DAS ELEKTRON IM STARKEN ZENTRALFELD

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung für Physik und Astronomie
an der Ruhr-Universität Bochum

von

ALI-REZA NEGHABIAN

aus

Ghutschan/Iran

1982

Bochum 1981

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41549226_0039

DAS ELEKTRON IM STARKEN ZENTRALFELD

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung für Physik und Astronomie
an der Ruhr-Universität Bochum

von

ALI-REZA NEGHABIAN

aus

Ghutschan/Iran

Bochum 1981

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Dissertation eingereicht am 1.12.1981

Tag der mündlichen Prüfung 2o. 1.1982

Referent: Professor Dr. W. Glöckle

Korreferent: Professor Dr. D. Wagner

Gedruckt mit Unterstützung des Deutschen
Akademischen Austauschdienstes.

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung
2.	Streuung eines Elektrons an einem Kern
2.1	Kinematik
2.2	Die T-Matrix
2.3	Konvergenz- bzw. Divergenzverhalten der Feynman-Graphen
3.	Streuung eines Elektrons an einem äußeren Coulomb-Potential
3.1	Durchführung des Limes $M \longrightarrow \infty$
3.2	Genäherte Propagatoren
3.2.1	Blankenbecler-Sugar-Propagator (ϑ_{BBS})
3.2.2	Gross-Propagator
3.3	Formfaktor zur Ladungsverteilung des Kerns
4.	Vakuum-Polarisationspotential
4.1	Darstellung des Vakuum-Polarisationspotentials durch $G(\vec{x},\vec{x},\omega)$ bzw. $\rho_{VP}(\vec{r})$
4.2	Partialwellendarstellung von G bzw. ρ_{VP}
4.3	Konstruktion von $sp(G^{>}_{\kappa=1})$ und $sp(G^{<}_{\kappa=1})$
4.4	Konstruktion von $sp(G^{><}_{\kappa=1})$
5.	Numerik
5.1	Bestimmung der Bindungsenergien und der Energieverschiebungen
5.1.1	X-Integration
5.1.2	K-Integration
5.1.3	Vergleich verschiedener Methoden zur Eigenwertbestimmung
5.2	Potentialberechnung
5.2.1	Bestimmung von $\rho^{+3}_{111}(r)$
5.2.1.1	Berechnung von $sp(G^{><}_{\kappa=1})$, $sp(G^{12<}_{\kappa=1})$ und der Y-Integration
5.2.1.2	Berechnung der Elektronendichte $\lvert\Psi_{\kappa,E_n}(r)\rvert^2$
5.2.2	Berechnung von $V^{+3}(q)$

6. Resultate

7. Zusammenfassung

Anhang A Notation

Anhang B Der Limes $M \longrightarrow \infty$

B.1 Der Grenzwert $M \longrightarrow \infty$ der Diagramme der Ordnung $(Z\alpha)^3$

B.2 Der Grenzwert $M \longrightarrow \infty$ der Diagramme der Ordnung $Z\,(Z\alpha)^3$

Anhang C Lösungen der Dirac-Gleichung

C.1 Elektron im Coulomb-Feld

C.2 Freies Elektron und Elektron im konstanten Potential

Anhang D Konstruktion der radialen Greensfunktion für die Dirac-Gleichung

D.1 Die Greensfunktion für $V(r)=0$ bzw. $V(r) = \text{Const}$

D.2 Die Greensfunktion für ein Coulomb-Potential $(V(r)=-\frac{Z}{r})$

Anhang E Berechnung der Whittaker-Funktionen

E.1 Berechnung von $M_{k,\mu}(x)$

E.1.1 Berechnung von $\varphi_1(a,c,x)$

E.1.1.1 $\mathrm{Re}(x) < 100$

E.1.1.2 $\mathrm{Re}(x) \geqslant 100$

E.2 Berechnung von $W_{k,\mu}(x)$

E.2.1 Berechnung von $\varphi_1(a,c,x)$

E.2.1.1 $0 < \mathrm{Re}(x) < 100$

E.2.1.2 $\mathrm{Re}(x) \geqslant 100$

Anhang F Berechnung von $\mathrm{chi}(z)$, z reell >0

F.1 $z \leqslant 0.99$

F.2 $z > 0.99$

1. Einleitung

Wenn man versucht, ein freies Elektron der Energie E durch ein starkes, unendlich ausgedehntes Potential (z.B. durch einen Potentialsprung $V > E + m$, m Masse des Elektrons) einzuschränken, dann ergibt sich aus den Lösungen der Dirac-Gleichung eine negative Stromdichte unter der Potentialschwelle und eine reflektierte Stromdichte, die größer als die ankommende ist. Dies steht im Gegensatz zur nichtrelativistischen Quantenmechanik und wird als Kleinsches Paradoxon bezeichnet[1]. Die Paradoxie löst sich jedoch auf, wenn man die negative Stromdichte als Positronenstrom interpretiert und gleichzeitig aus Gründen der Ladungserhaltung die Erzeugung einer entsprechenden Anzahl von Elektronen postuliert (Elektron-Positron-Erzeugung); nähere Einzelheiten findet man in der Arbeit von Süssmann et al[2]. Das Kleinsche Paradoxon führte zur Untersuchung von Elektronen im Feld überschwerer Kerne (stark lokalisiertes Feld). In diesem Zusammenhang hat man[3] die Abhängigkeit der Energieeigenwerte der Dirac-Gleichung von der Tiefe eines Potentialtopfes V_0 mit dem Radius R untersucht. Dabei wurde gezeigt, daß sich der Wert der Energie für jeden gebundenen Zustand kontinuierlich bei Zunahme von V_0 verringert und schließlich bei bestimmten V_0 (V_c) das negative Kontinuum erreicht.

Die Lösungen der Dirac-Gleichung für einen punktförmigen Kern existieren nur bis $Z \approx 137$, für größere Z werden sie singulär. Pomeranchuk und Somorodinski[4] haben jedoch gezeigt, daß unter Berücksichtigung der Ausdehnung des Kerns keine Singularität für $Z \approx 137$ auftritt. Vielmehr sinkt das $1S_{1/2}$-Niveau bei wachsender Kernladungszahl Z immer weiter ab und erreicht schließlich bei $Z_c \approx 200$ das negative Kontinuum (E=-m). Als Modell für den Kern wurde dabei eine homogen geladene Kugelschale mit dem Radius R=12fm verwendet. Pieper und Greiner[5] haben durch numerische Lösung der Dirac-Gleichung für ein Elektron im Coulomb-Feld eines homogen geladenen Kerns das Verhalten der Elektronen-Niveaus quantitativ untersucht und den Wert Z_c=169 für das $1S_{1/2}$-, Z_c=182 für das $2P_{1/2}$-Niveau usw. erhalten. Diese stimmen mit den von Popov[6] angegebenen Werten überein. Popov[6-7] hat durch die analytische Lösung der Dirac-Gleichung für E=-m

eine Gleichung für die kritische Ladungszahl Z_c aufgestellt. Außerdem hat er gezeigt, daß die Wellenfunktion des Elektrons bei E=-m exponentiell abfällt und die mittleren Radien der Niveaus dort endlich bleiben (Lokalisierung der Zustände bei E=-m). Pieper, Greiner[5] und Popov[6-8] haben behauptet, daß bei Erhöhung von Z über Z_c hinaus spontane Positronenemissionen auftreten können. Voraussetzung für die Emission des Positrons ist ein nicht oder nur zum Teil besetzter Zustand. Nach dem Eintauchen des Elektronenniveaus in das negative Kontinuum bekommt die Energie einen imaginären Anteil (quasistationärer Zustand), und dieser steht mit der Wahrscheinlichkeitsdichte für die Positronenemission in Zusammenhang[8]. Greiner et al.[9-12] haben auch gezeigt, daß für $Z > Z_c$ der Bindungszustand $|\varphi\rangle$ in das negative Kontinuum eintaucht. Er existiert dann nicht mehr als Bindungszustand, sondern bildet eine Beimischung zu Streuungszuständen negativer Energie. Die Amplitude von $|\varphi\rangle$ hat in einem bestimmten Energiebereich ein Resonanzverhalten, dessen Breite mit der Wahrscheinlichkeitsdichte für die Emission von Positronen in Zusammenhang steht.

Da die Erzeugung von superschweren Ionen mit $Z > Z_c$ noch nicht gelungen ist, versucht man, durch die Streuung schwerer Ionen mit $Z_1 + Z_2 > Z_c$ zu entscheiden, ob spontane Positronenemissionen stattfinden. Hierzu gibt es eine Reihe theoretischer Arbeiten (siehe Referenz 13) von Greiner et al. und Popov, die sich mit der Frage, wie man den Wirkungsquerschnitt dieser spontanen Positronenemission bei der Schwer-Ionen-Streuung berechnet und wieweit dieser Wirkungsquerschnitt durch andere Effekte beeinflußt werden kann, beschäftigt haben. Dazu gehören z.B. die Bremsstrahlung der spontan emittierten Positronen, die Erzeugung von e^+-e^--Paar durch Kern-Kern-Streuung usw.. Experimentell scheint[14] neben oben genannten und weiteren dynamischen Prozessen eine weitere Quelle für Positronenemission bei Quasiatomen mit überkritischer Ladungszahl vorhanden zu sein. Hier gibt es jedoch noch Diskrepanzen zur Theorie.

Pieper und Greiner haben außerdem die Vakuum-Polarisation der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ (Uehling-Potential) mittels Störungstheorie 1. Ordnung berechnet und festgestellt, daß diese Korrektur das Eintauchen des Niveaus geringfügig beschleunigt. Es gibt eine Reihe von Autoren, wie Wichmann und Kroll oder Gyulassy[15-22],

die sich mit der Vakuum-Polarisation in höheren Ordnungen in $Z\alpha$ beschäftigt haben. Sie stimmen mit Greiner dahingehend überein, daß der Nettoeffekt der Vakuum-Polarisation das Eintauchen geringfügig beschleunigt. Dagegen wurde von Panchapakesan[23] behauptet, daß bei $Z \to Z_c$ die Vakuum-Polarisation das Eintauchen verhindert. Es gibt außerdem Selbstenergiekorrekturen. Darüber existieren Arbeiten von Brown und Schaefer[24-25], Mohr[26-27] und insbesondere von Cheng und Johnson[28-29]. Die letzteren zeigen, daß das repulsive Verhalten der Selbstenergie gegen den kritischen Wert von Z anwächst, was wiederum das kritische $Z(Z_c)$ modifizieren wird. Bei kleinerem Z bestehen Diskrepanzen zwischen den Ergebnissen verschiedener Autoren.
Also hat man ausgehend von der Dirac-Gleichung für ein Elektron im äußeren Coulomb-Feld das Eintauchen der Elektronenniveaus und spontane Positronenemissionen für überschwere Kerne $Z > Z_c$ behauptet. In diesem Zusammenhang wurden auch Strahlungskorrekturen, die eine Folge der Quantenelektrodynamik sind, untersucht.
Ausgehend von diesen Arbeiten, insbesondere derjenigen von Greiner et al., die sich sehr stark allein auf die Dirac-Gleichung stützen, erschien es uns zunächst notwendig, die Behandlung des Systems Elektron und Kern in den allgemeinen Rahmen der Quantenelektrodynamik zu stellen. Wir stellten uns also vorerst einige Fragen:
Inwieweit kann man die Vielzahl der Feynman-Diagramme, die die Wechselwirkung des Elektrons mit einer schweren Ladung der Masse M (Kern) beschreiben, durch das System Elektron im äußeren Potential ersetzen? Falls dies möglich ist, wie leitet sich dabei das äußere Coulomb-Potential ab und welche anderen Beiträge zum Potential stellen sich ein? In anderen Worten, welcher verallgemeinerten Dirac-Gleichung gehorcht das Elektron?
Da dieser Übergang zu einem äußeren Potential natürlich über den Limes $M \to \infty$ vollzogen wird, kann man sich die Frage stellen, ist es möglich einen genäherten Propagator für die Bethe-Salpeter-Gleichung des Ausgangsystems Elektron plus schwere Ladung anzugeben, der im Limes $M \to \infty$ die gesuchte verallgemeinerte Dirac-Gleichung liefert?
Die bisherigen oben genannten Untersuchungen wurden durchweg im Ortsraum durchgeführt, welcher nicht das natürliche System für die zugrundeliegende Formalisierung darstellt, die natürlich

im Impulsraum vorliegt. Außerdem wurde Störungstheorie bezüglich der Zusatzpotentiale angewandt. Wir stellten uns deswegen die Frage, ob die verallgemeinerte Dirac-Gleichung nicht direkt im Impulsraum gelöst werden kann. Dies ist auch deswegen von großem Interesse, da die bestehenden langwierigen und umfangreichen Rechnungen im Ortsraum einer Nachprüfung durch ein unabhängiges Verfahren im Impulsraum bedürfen. Außerdem war zu hoffen, daß in der Impulsraumbehandlung nichtlineare Effekte, wie sie im Teil 3.1 angedeutet werden, berücksichtigt werden können.

Ursprünglich war natürlich beabsichtigt, das Verfahren des vollen quantenelektrodynamischen Systems für überkritische Z zu untersuchen, was sicher noch sehr kontrovers ist. Die Behandlung der genannten Fragen brachte jedoch so viele Probleme mit sich, daß wir diese Fragen im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr in Angriff nehmen konnten.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert. Wir wollen zunächst von der Annahme ausgehen, daß das Elektron den Kern als Gesamtladung sieht und wollen von der Nukleonenstruktur absehen. Der Kern erscheint also zunächst wie ein schweres Proton der Masse M. Damit kann man die Elektron-Proton-Streuung allgemein im Rahmen der Quantenelektrodynamik formulieren. Dies geschieht in Teil 2. Dort wird auch die Kinematik und die Konvergenz bzw. Divergenz der Feynman-Graphen studiert. In Teil 3 untersuche ich dann den Limes $M \to \infty$. Dies führt auf eine verallgemeinerte Dirac-Gleichung, in der sämtliche Potentiale, die das Elektron spürt, über die Quantenelektrodynamik definiert sind. Es zeigt sich, um ein Ergebnis vorwegzunehmen, daß das äußere Coulomb-Potential als komplizierte Überlagerung von gekreuzten und nicht gekreuzten Photonenaustäuschen zustande kommt. Außerdem werden die Klassen von Diagrammen herausgesondert, die führend sind für große Z . Dies führt auf die Zusatzpotentiale zum Coulomb-Potential herrührend von Vakuum-Polarisation und Selbstenergie. In diesem Zusammenhang des Limes $M \to \infty$ wird die Gültigkeit genäherter Propagatoren von Elektron und Proton untersucht, die im Limes $M \to \infty$ die Bethe-Salpeter-Gleichung direkt in die verallgemeinerte Dirac-Gleichung überführen sollen. Es stellt sich heraus, daß dieser Mechanismus nur bei Hinzunahme von Formfaktoren entsprechend einer ausgedehnten Kernladungsverteilung erfolgreich sein kann. Den Zusammenhang zwischen dem Vakuum-Polarisations-

potential und der relativistischen Greensfunktion bzw. der induzierten Ladungsdichte erläutere ich in Teil 4. Außerdem gebe ich hier die Ausdrücke für die verschieden auftretenden Greensfunktionen an. Die Lösung der Dirac-Gleichung im Impulsraum wird in Kapitel 5 beschrieben. Dabei werden numerische Details diskutiert. Die Resultate werden in Teil 6 dargestellt. Kapitel 7 enthält schließlich die Zusammenfassung. In den Anhängen findet man einige Formeln, Beweise und die technischen Einzelheiten, die aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht in den Hauptteil aufgenommen worden sind.

2. Streuung eines Elektrons an einem Kern

In diesem Abschnitt werden die Kinematik und die T-Matrix der Elektron-Kern-Streuung dargestellt. Dabei wird das Konvergenzverhalten der Feynman-Graphen diskutiert.

2.1 Kinematik

Die Kinematik, die ich bei der Behandlung der Elektron-Kern-Streuung verwenden werde, kann man aus Abb. 2.1 ablesen.

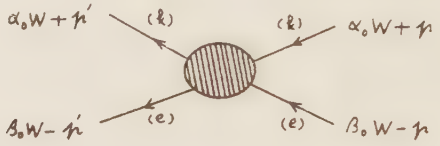


Abb. 2.1 Kinematik des Streuungsprozesses

Hier sind p und p' die Relativimpulse für die einlaufenden bzw. die auslaufenden Teilchen. α_0 und β_0 sind gegeben durch:

$$\alpha_0 = \frac{M}{M+m} \quad , \quad \beta_0 = \frac{m}{M+m} \quad , \quad \alpha_0 + \beta_0 = 1 \, , \tag{2.1.1}$$

wobei M die Masse des Kerns und m die Masse des Elektrons ist. Für Teilchen auf der Massenschale (on-shell) gilt:

$$(\alpha_0 W + p)^2 = (\alpha_0 W + p_0)^2 - \vec{p}^{\,2} = M^2 \tag{2.1.2}$$

$$(\beta_0 W - p)^2 = (\beta_0 W - p_0)^2 - \vec{p}^{\,2} = m^2 \tag{2.1.3}$$

Daraus folgt

$$\alpha_0 W + p = E_p \quad , \quad \beta_0 W - p_0 = e_p \quad , \quad W = E_p + e_p \tag{2.1.4}$$

Falls die Teilchen nicht auf der Massenschale (off-shell) sind, gilt $(\alpha_0 W + p)^2 \neq M^2$, $(\beta_0 W - p)^2 \neq m^2$, (2.1.5)

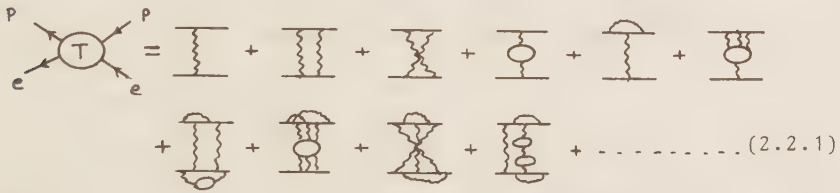
und im Falle eines Bindungszustandes ist

$$W = M + m - \varepsilon_b \, , \; \varepsilon_b > 0 \, , \tag{2.1.6}$$

wobei ε_b die Bindungsenergie ist.

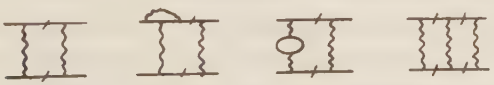
2.2 Die T-Matrix

Bei der Wechselwirkung (WW) zwischen einem Elektron und einem Kern gehe ich von der Annahme aus, daß ich zunächst den Kern als schwere Punktladung betrachten und ihm später (siehe 3.3) eine klassische Ladungsverteilung zuordnen kann. Bei diesem Modell für den Kern wird von den inneren Freiheitsgraden des Kerns, wie z.B. Anregungszuständen, abgesehen, d.h. der Kern verhält sich wie ein schweres Proton.
Deshalb betrachte ich zunächst die WW zwischen einem Elektron und einem Proton. Da diese über viele mögliche Prozesse laufen kann, gehe ich von der Quantenelektrodynamik aus und schreibe alle möglichen Feynman-Graphen, die zu dieser WW beitragen, hin



.....(2.2.1)

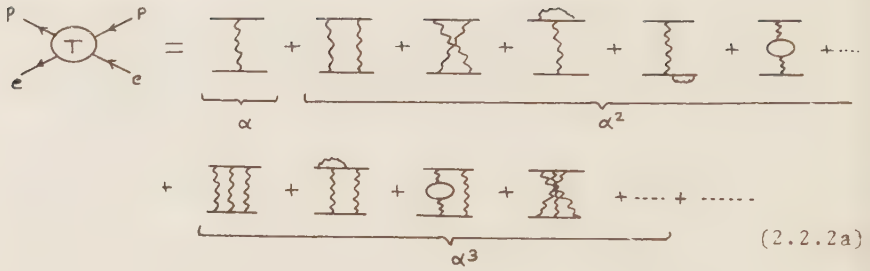
Diese Graphen kann man in zwei verschiedene Klassen einteilen: in reduzible und irreduzible Graphen. Die irreduziblen Diagramme lassen sich nicht durch Zerschneiden von je einer Elektron- und Proton-Linie in zwei getrennte, zusammenhängende, existierende Diagramme zerlegen, während das für reduzible Graphen möglich ist. Beispielsweise sind folgende Graphen reduzibel



bzw. irreduzibel

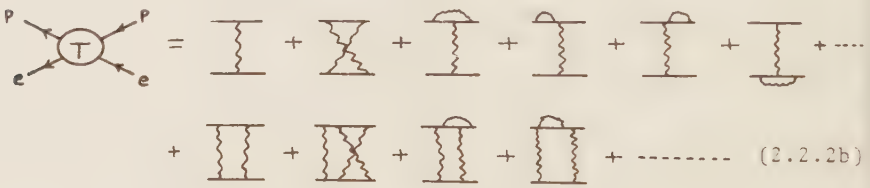
Man ordnet im allgemeinen die Graphen nach ihrer Ordnung, welche man durch Abzählen der Vertices bestimmt. Z.B. ist die Ordnung des Graphes e^2 oder $\alpha = \frac{e^2}{4\pi}$ und die des Graphes α^2.

Damit wird



(2.2.2a)

oder nach reduziblen und irreduziblen Graphen geordnet:



(2.2.2b)

Diese letzte Anordnung erlaubt unmittelbar die Aufsummation in die Integralgleichung:

(2.2.3)

$$T(p,p') = V(p,p') + \int d^4k\, V(p,k)\, G_{BS}(k)\, T(k,p') \qquad (2.2.4)$$

Dies ist die relativistische Bethe-Salpeter-Gleichung (ohne die äußeren Beine geschrieben) und es sind: p und p' die Relativimpulse für die einlaufenden bzw. die auslaufenden Teilchen, $V(p,p')$ die Summe aller irreduziblen Graphen und $G_{BS}(K)$ die relativistische Proton-Elektron-Greensfunktion

$$G_{BS}(K) = \frac{1}{(2\pi)} \left[\frac{\gamma(\alpha_0 W + K) + m_p}{(\alpha_0 W + K)^2 - m_p^2 + i\varepsilon} \right]^{(P)} \left[\frac{\gamma(\beta_0 W - k) + m}{(\beta_0 W - K)^2 - m^2 + i\varepsilon} \right]^{(e)} \qquad (2.2.5)$$

Man kann die Feynman-Graphen, die zur T-Matrix beitragen, in zwei andere Klassen einteilen, die man Skelette und Renormierungsdiagramme nennt. Die Skelettgraphen sind alle reduziblen und irreduziblen Diagramme, die man durch Entfernen aller

Selbstenergie- und Vertexeinschübe erhält. Umgekehrt sind die Renormierungsdiagramme alle reduziblen und irreduziblen Graphen, die man aus den Skelettgraphen erhält, wenn man in diese eine oder mehrere Selbstenergie- oder Vertexteile einbaut. In Abb. 2.2.1 sind Beispiele für Selbstenergie- und Vertexgraphen angegeben.

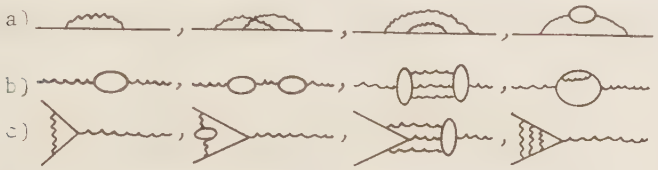


Abb. 2.2.1 Beispiele für a) Selbstenergiegraphen der Fermionen, b) Selbstenergiegraphen des Photons und c) Vertexdiagramme

Damit kann man schreiben

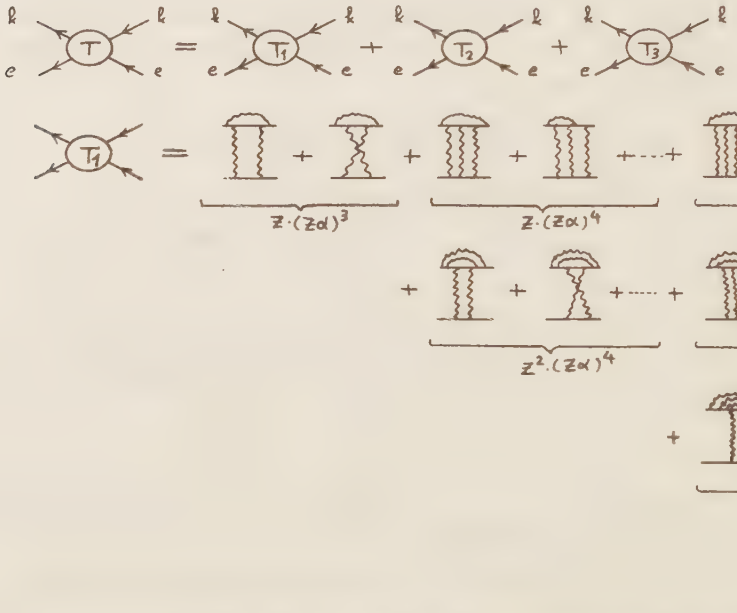
$$T(n,n') = \sum_{\text{Skelette}} T^{S}(n,n',S_F,D_F,\gamma_\mu,e) + \text{Renormierungsgraphen} \qquad (2.2.6)$$

wobei S_F der Elektron- bzw. Proton-Propagator und D_F der Photon-Propagator ist.

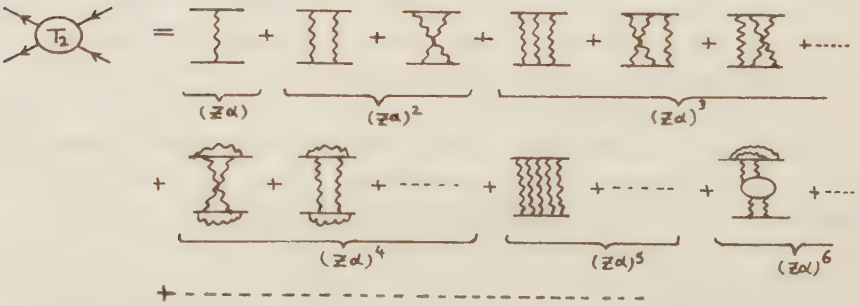
Um die Feynman-Graphen bzw. die T-Matrix, die zur Wechselwirkung zwischen einem Elektron und einem Kern der Ladung $-Ze > 0$ und der Masse M beitragen, zu erhalten, ersetze ich die Ladung des Protons $-e > 0$ durch $-Ze > 0$ und die Masse des Protons m_p durch M. Die Ordnung jedes Diagramms ist nun durch $Z^l \alpha^m (Z\alpha)^n$ $(l,m \geq 0, n \geq 1)$ gegeben. Da ich später die Bindungsenergie des Elektrons in der Nähe des Eintauchens der Elektronenniveaus ins negative Kontinuum bestimmen will, kann $Z > 137$ bzw. $Z\alpha > 1$ werden. Für solche Z werden Graphen mit höherer Ordnung in $(Z\alpha)$ bzw. Z wichtiger als solche mit niedrigen Potenzen von $(Z\alpha)$ bzw. Z. Deshalb ordne ich zunächst die Gesamtheit der Skelettgraphen nach ihrer Wichtigkeit in drei Gruppen:

a) alle Skelettgraphen der Ordnung $Z^i(Z\alpha)^k$ $(i \geq 1, k \geq 3)$,
b) alle Skelettgraphen der Ordnung $(Z\alpha)^k$ $(k \geq 1)$ und
c) alle Skelettgraphen der Ordnung $\alpha^i (Z\alpha)^k$ $(i \geq 1, k \geq 2)$.

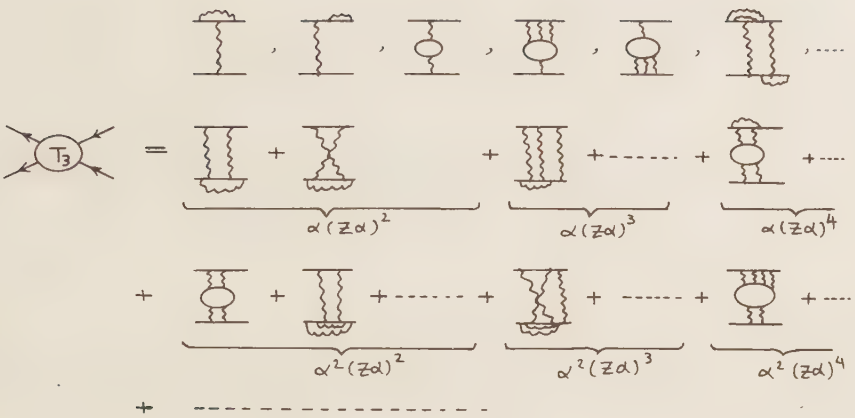
Danach berücksichtige ich die zu jeder Gruppe gehörigen Renormierungsgraphen. Damit kann man schreiben:



+ die dazugehörigen Renormierungsdiagramme wie z.B.



+ die dazugehörigen Renormierungsdiagramme wie z.B.

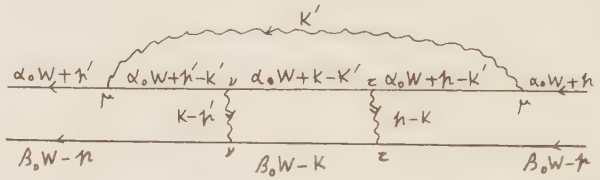


+ die dazugehörigen Renormierungsdiagramme wie z.B.

2.3 Konvergenz- bzw. Divergenzverhalten der Feynman-Graphen

Als Beispiel untersuche ich das Feynman-Diagramm

$I^{(2)}(\not p,\not p') =$



(2.3.1)

Mit den Feynman-Regeln erhält man

$$I^{(2)}(\not p,\not p') \sim \int d^4K \int d^4K' \left\{ \left[\gamma^\mu \frac{\gamma(\alpha_0 W+\not p'-K')+M}{(\alpha_0 W+\not p'-K')^2-M^2+i\varepsilon} \gamma^\nu \frac{\gamma(\alpha_0 W+K-K')+M}{(\alpha_0 W+K-K')^2-M^2+i\varepsilon} \gamma^\varepsilon \right.\right.$$

$$\left. \times \frac{\gamma(\alpha_0 W+\not p-K')+M}{(\alpha_0 W+\not p-K')^2-M^2+i\varepsilon} \gamma_\mu \right]^{(k)} \frac{1}{K'^2+i\varepsilon} \quad \frac{1}{(K-\not p')^2+i\varepsilon} \quad \frac{1}{(\not p-K)^2+i\varepsilon}$$

$$\left. \times \left[\gamma_\nu \frac{\gamma(\beta_0 W-K)+m}{(\beta_0 W-K)^2-m^2+i\varepsilon} \gamma_\varepsilon \right]^{(e)} \right\} \qquad (2.3.2)$$

1. $K\to\infty$: Das K-Integral verhält sich wie $\int dK \frac{K^5}{K^8}$, es konvergiert wie $\frac{1}{K^2}$
2. $K'\to\infty$: Das K-Integral verhält sich wie $\int dK' \frac{K'^6}{K'^8}$, es konvergiert wie $\frac{1}{K'}$
3. Infrarotdivergenz des K-Integrals:

a) sei $\not p=\not p'$ und seien die äußeren Teilchen off-shell, dann wird das K-Integral an der Stelle $\not p=K$ divergent. Setzt man nämlich $K_1=\not p-K$, so erhält man für $K_1\to 0$ das K-Integral $\int d^4K_1 \frac{1}{K_1^4} f_1(K_1,K',\not p)$ wobei $f_1(K_1,K',\not p)$ für $K_1\to 0$ endlich ist. Das gleiche gilt für $K=\not p'$.

b) Sei $\not p$ und $\not p'$ beliebig und die äußeren Teilchen on-shell, dann wird das K-Integral für $K'=0$ an der Stelle $\not p=K$ divergent. Mit $K_1=\not p-K$ erhält man nämlich (für das K-Integral):

$$\int d^4K_1 \left(\frac{\gamma(\alpha_0 W+\not p-K_1-K')+M}{(K_1+K')^2-2(\alpha_0 W+\not p)(K_1+K')+i\varepsilon} \right) \frac{1}{K_1^2+i\varepsilon} \quad \frac{1}{(\not p-\not p'-K_1)^2+i\varepsilon}$$

$$\left[\gamma_\nu \frac{\gamma(\beta_0 W-\not p+K_1)+m}{K_1^2+2K_1(\beta_0 W-\not p)+i\varepsilon} \gamma_\varepsilon \right]^{(e)} \xrightarrow{K_1\to 0} \int \frac{d^4K_1}{K_1^4} f_2(K_1,\not p,\not p'), \qquad (2.3.3)$$

wobei $f_2(K_1,\not p,\not p')$ für $K_1\to 0$ endlich ist. Das gleiche gilt auch

für $\not{p}=\not{k}$. Aus (2.3.3) erkennt man, daß für $k'\neq 0$ das K_1-Integral nur im Falle $\not{p}=\not{p}'$(wie im Falle a) divergent werden kann.

Die Ursache für solche Infrarotdivergenzen ist die Masselosigkeit der Photonen bzw. Langreichweitigkeit des Coulomb- Potentials. Bei der Berechnung der Bindungsenergie e_b sind die Teilchen off-shell, und deshalb kommt nur die Singularität aus Fall a vor. Da man e_b aus der homogenen Bethe-Salpeter-Gleichung (siehe 3.1.32):

$$\Psi(P) = G_{BS}(P) \int d^4K \, V(P,K) \, \Psi(K) \tag{2.3.4}$$

bestimmt, ist diese Singularität integrabel.

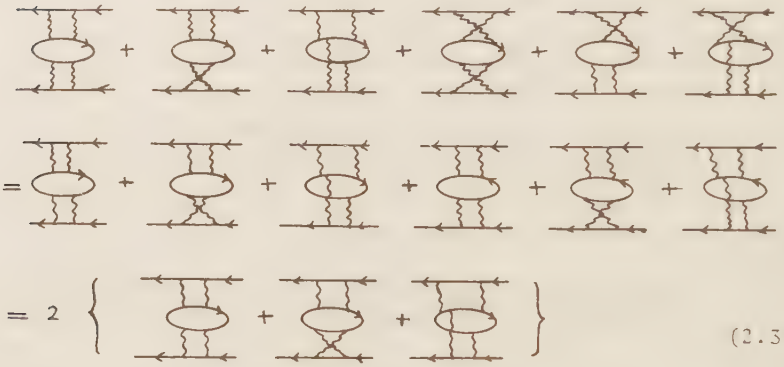
4. Infrarotdivergenz des K'-Integrals:
Seien die äußeren Teilchen on-shell, dann wird das K'-Integral für $K'\to 0$ divergent; benutzt man nämlich für die on-shell Teilchen $(\alpha_0 W+\not{p}')=M^2$, $(\beta_0 W-\not{p}')^2=m^2$, so erhält man für das K'-Integral

$$\int \frac{d^4K'}{K'^2+i\varepsilon} \Big[\gamma^\mu \frac{\gamma(\alpha_0 W+\not{p}'-K')+M}{K'^2-2(\alpha_0 W+\not{p}')K'+i\varepsilon} \gamma^\nu \frac{\gamma(\alpha_0 W+K-K')+M}{(\alpha_0 W+k-K')^2-M^2+i\varepsilon} \gamma^\tau \times \frac{\gamma(\alpha_0 W+\not{p}-K')+M}{K'^2-2(\alpha_0 W+\not{p})K'+i\varepsilon} \gamma_\mu \Big]^{(k)} \xrightarrow{K'\to 0} \int \frac{d^4K'}{K'^4+i\varepsilon} f_3(K,K',\not{p},\not{p}'), \tag{2.3.5}$$

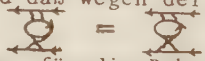
wobei $f_3(K,K',\not{p},\not{p}')$ für $K'\to 0$ endlich ist. (Falls die äußeren Teilchen off-shell sind, gilt die Gleichung (3.3.5) nicht und damit tritt keine Divergenz auf.)
Der Ursprung solch einer Infrarotdivergenz ist bekannt: er liegt in der Fähigkeit der Teilchen, bei der Streuung weiche Photonen ausstrahlen zu können. D.h. weitere infrarot divergente Diagramme entsprechend diesen weichen Bremsstrahl-Prozessen sind zu addieren und die Singularität hebt sich bei der Berechnung des Wirkungsquerschnitts weg. (siehe Bjorken, Drell[1] und Yennie[31])
Bei der Berechnung der Bindungsenergien, wo man off-shell rechnet, kommt diese Singularität nicht vor.

Analog kann man die übrigen Diagramme auf ihr Konvergenz- bzw. Divergenzverhalten hin untersuchen. Abgesehen von Infrarotdivergenzen ergeben sich folgende Regeln[32-33] :

I. Alle Skelettgraphen sind für große Werte der Integrationsvariablen ($K\to\infty$) konvergent, mit Ausnahme der Skelettgraphen, die innere Loops mit 4 Vertices enthalten, wie z.B. . Diese sind logarithmisch divergent[34]. Jauch und Rohrlich[32] haben jedoch bei der Photon-Photon-Streuung gezeigt, daß sich diese divergenten Anteile wegheben, wenn man die Summe aller 6 möglichen Graphen berechnet. D.h.



(2.3.6)

ist endlich. Dabei habe ich die Tatsache benutzt, daß z.B. das Diagramm topologisch äquivalent zum Diagramm ist, und daß wegen der Ladungskonjugationsoperation gilt[33]: 

(Für weitere Methoden für die Behandlung dieser Divergenz siehe Jauch und Rohrlich[32], Kapitel 13)

II. Alle Renormierungsgraphen, die einen oder mehrere primitiv divergente Teile, wie z.B.

oder eine Kombination davon (divergent, aber nicht primitiv divergent)

enthalten, sind für große Werte der Integrationsvariablen ($K \to \infty$) divergent (ultraviolett divergent).
Sie werden endlich, wenn man eine Massen-, Ladungs- und Wellenfunktionsrenormierung durchführt.

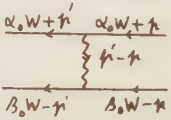
III. Alle Renormierungsdiagramme, die nur innere Loops mit n Vertices ($n \geqslant 6$) enthalten, sind für $K \to \infty$ konvergent.

3. Streuung eines Elektrons an einem äußeren Coulomb-Potential

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie man das System Elektron plus schwere positive Ladung durch das System Elektron im äußeren Coulomb-Potential ersetzen kann und wie dieses äußere Potential definiert ist. Dann wird die verallgemeinerte Dirac-Gleichung für das Elektron dargestellt. Außerdem wird gezeigt, daß die Suche nach einem genäherten Propagator für die Bethe-Salpeter-Gleichung, der im Limes $M\to\infty$ die gesuchte Dirac-Gleichung liefert, wenig sinnvoll ist. Danach wird der Formfaktor für die Ausdehnung des Kerns eingeführt.

3.1 Durchführung des Limes $M\to\infty$

Da mit Erhöhung der Protonenzahl Z der Kern immer schwerer wird, ist es sinnvoll, den Limes $M\to\infty$ für die T-Matrix zu bilden. Als Beispiel führe ich den Limes $M\to\infty$ für das Ein-Photon-Austausch-Diagramm vor (im folgenden werden die äußeren Teilchen als freie Teilchen (on-shell) betrachtet).



$$\lim_{M\to\infty} = \lim_{M\to\infty}\left\{\frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{M^2}{E_p\cdot E_{p'}}}\left[\bar u(\vec p')(ize\gamma^\mu)u(\vec p)\right]^{(k)}\right.$$

$$\left.\times\frac{-\lambda}{(p-p')^2+i\varepsilon}\;\frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_p\cdot e_{p'}}}\left[\bar u(-\vec p')(-ie\gamma_\mu)u(-\vec p)\right]^{(k)}\right\},\tag{3.1.1}$$

wobei $\bar u, u$ die Dirac-Spinoren für freie Teilchen sind (siehe Anhang A) und $E_p=\sqrt{\vec p^{\,2}+M^2}$, $e_p=\sqrt{\vec p^{\,2}+m^2}$. Es gilt:

$$\lim_{M\to\infty}\sqrt{\frac{M^2}{E_p\cdot E_{p'}}}=1 \tag{3.1.2a}$$

$$p_0=p_0',\quad \beta W=m \tag{3.1.2b}$$

$$\lim_{M\to\infty}\left[\bar u(\vec p)\,\gamma^\mu u(\vec p)\right]^{(k)}=\delta^{\mu 0} \tag{3.1.3}$$

$$\lim_{M\to\infty}(p-p')^2=\lim_{M\to\infty}\left[(p_0-p_0')^2-(\vec p-\vec p')^2\right]=-(\vec p-\vec p')^2. \tag{3.1.4}$$

Damit erhalte ich:

$$\lim_{M\to\infty} \quad = \quad = \frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_p\cdot e_{p'}}}\;\bar{u}^{(e)}(\vec{p}')\,V_1^{\circ}(\vec{p}',\vec{p})\,u^{(e)}(\vec{p}), \tag{3.1.5a}$$

wobei $P=\beta_0 W-p$, $P'=\beta_0 W-p'$, $V_1^{\circ}(\vec{p}',\vec{p}) = \dfrac{i\,Z e^2\,\gamma^{\circ}}{(2\pi)^3\,(\vec{p}-\vec{p}')^2}$ (3.1.5b)

und das Diagramm die Streuung eines Elektrons im äußeren Coulomb-Feld der Ordnung $Z\alpha$ angibt.
Bei der Berechnung der Streuung eines Elektrons im äußeren Coulomb-Potential in 2. Ordnung in $(Z\alpha)$ erwartet man, daß allein der Limes $M\to\infty$ des Box-Diagrammes beiträgt, da man[35-36] bei der Streuung skalarer Teilchen gleicher Masse festgestellt hat, daß im Limes $M\to\infty$ das Box-Diagramm den führenden Term in 4. Ordnung liefert. Wie anschließend gezeigt wird, ist für den hier behandelten Fall das Diagramm genauso wichtig wie das Box-Diagramm, und im Limes $M\to\infty$ ergibt die Summe der beiden Diagramme die Streuung des Elektrons im äußeren Coulomb-Potential in 2. Ordnung in $(Z\alpha)$. Sei

$$I_B(p,p') = \lim_{M\to\infty}\Big\{ \quad \Big\}$$

$$= \lim_{M\to\infty}\Big\{ \frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{M^2}{E_p\cdot E_{p'}}}\;\frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_p\cdot e_{p'}}}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\Big[\bar{u}(p)(ize\gamma^{\mu})$$

$$\times\;\frac{i\big(\gamma(\alpha_0 W+k)+M\big)}{(\alpha_0 W+k)^2-M^2+i\varepsilon}(ize\gamma^{\nu})\Big]^{(k)}\;\frac{-i}{(k-p')^2+i\varepsilon}\;\frac{-i}{(p-k)^2+i\varepsilon}$$

$$\times\Big[(-ie\gamma_{\mu})\frac{i\big(\gamma(\beta_0 W-k)+m\big)}{(\beta_0 W-k)^2-m^2+i\varepsilon}(-ie\gamma_{\nu})\Big]^{(e)}\Big\}$$

$$\cong \lim_{M\to\infty}\int d^4k\; f_B(k,M)\,. \tag{3.1.6}$$

Hier erkennt man, daß für die Konvergenz des K-Integrals allein der Elektron-Propagator und die Photonen-Propagatoren genügen, d.h. das K-Integral konvergiert für jeden beliebigen

Kern-Propagator bzw. für jede beliebige Kernmasse M. Es scheint demnach plausibel, daß das K-Integral bezüglich M gleichmäßig konvergiert und man den Limes und die Integration vertauschen kann. Ich konnte dies streng zeigen, ohne dies jedoch hier auszuführen. Ich vertausche den Limes und die Integration und betrachte den M-abhängigen Anteil des Integrals. Wegen (3.1.2) und (3.1.3) und der Relationen (siehe Anhang A)

$$\frac{\gamma(\alpha_0 W+k)+M}{(\alpha_0 W+k)^2-M^2+i\varepsilon} = \left[\frac{M}{E_K}\,\frac{\Lambda_{(+)}(\vec{k})}{\alpha_0 W+K_0-E_K+i\varepsilon} - \frac{M}{E_K}\,\frac{\Lambda_{(-)}(-\vec{k})}{\alpha_0 W+K_0+E_K}\right]$$

$$\xrightarrow[M\to\infty]{} \frac{\Lambda_{(+)}(\vec{k})}{\alpha_0 W+K_0-E_K} = \frac{\Lambda_{(+)}(\vec{k})}{(\alpha_0 W+\eta_0)+(k_0-\eta_0)-E_k+i\varepsilon}$$

$$\approx \frac{\Lambda_{(+)}(\vec{k})}{k_0-\eta_0+i\varepsilon}, \qquad (3.1.7)$$

wobei

$$\Lambda_{(+)}(\vec{k}) = \frac{1}{2M}(\gamma^0 E_k - \vec{\gamma}\cdot\vec{k}+M) = \sum_\lambda u_\lambda(\vec{k})\,\bar{u}_\lambda(\vec{k}), \qquad (3.1.8)$$

$$\Lambda_{(-)}(-\vec{k}) = \frac{1}{2M}(-\gamma^0 E_k - \vec{\gamma}\cdot\vec{k}+M) = -\sum_\lambda v_\lambda(-\vec{k})\,\bar{v}_\lambda(-\vec{k}) \qquad (3.1.9)$$

ist, erhalte ich

$$\lim_{M\to\infty}\sqrt{\frac{M^2}{E_\eta\cdot E_{\eta'}}}\left[\bar{u}(\vec{\eta}')(ize\gamma^\nu)\,\frac{i(\gamma(\alpha_0 W+k)+M)}{(\alpha_0 W+k)^2-M^2+i\varepsilon}\,(ize\gamma^\nu)\,u(\vec{\eta})\right]^{(k)}$$

$$= (ize)^2\,\delta^{\mu 0}\delta^{\nu 0}\,\frac{i}{(k_0-\eta_0)+i\varepsilon} \qquad (3.1.10)$$

Damit ist

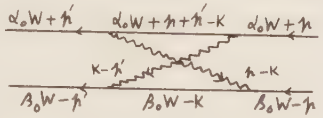
$$I_B(\eta,\eta') = \frac{(ize)^2\delta^{\mu 0}\delta^{\nu 0}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_\eta\cdot e_{\eta'}}}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\,\frac{1}{(k_0-\eta_0)+i\varepsilon}\,\frac{-i}{(k-\eta')^2+i\varepsilon}$$

$$\times\,\frac{-i}{(\eta-k)^2+i\varepsilon}\left[\bar{u}(-\vec{\eta}')(-ie\gamma_\mu)\,iS_F(\alpha_0 W-k)(-ie\gamma_\nu)u(-\vec{\eta})\right]^{(e)}, \qquad (3.1.11)$$

wobei $iS_F(\alpha_0 W-K) = \frac{i(\gamma(\alpha_0 W-k)+m)}{(\alpha_0 W-k)^2-m^2+i\varepsilon}$ der Elektron-Propagator ist. Die Gleichung (3.1.11) stellt den führenden Term des Box-Diagramms bei Limes $M\to\infty$ dar, d.h. alle Korrekturterme wie $\frac{1}{M}, \frac{1}{M^2}, \ldots$ wurden vernachlässigt. Aus (3.1.11) wird ersichtlich, daß der Limes $M\to\infty$ des Box-Diagramms allein nicht die zweimalige

Iteration der Coulomb-Wechselwirkung darstellt. Analog erhalte ich

$$I_K(\eta,\eta') = \lim_{M\to\infty}$$



$$= \frac{(ize)^2 \delta^{\mu\nu}\gamma_\mu^0\gamma_\nu^0}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_\eta\cdot e_{\eta'}}}\int\frac{d^4K}{(2\pi)^4}\,\frac{i}{(\eta_0-k_0)+i\varepsilon}\,\frac{-i}{(K-\eta')^2+i\varepsilon}$$

$$\times\,\frac{-i}{(\eta-K)^2+i\varepsilon}\left[\bar{u}(-\vec{\eta}')(-ie\gamma_\mu)\,iS_F(\beta_0 W-K)(-ie\gamma_\nu)\,u(-\vec{\eta})\right]^{(e)}. \qquad (3.1.12)$$

(3.1.12) zeigt uns, daß der Limes $M\to\infty$ des ⊠ vom Betrag her genauso wichtig ist wie das Box-Diagramm und er erfüllt ebenso allein nicht die erwartete Bedeutung. Aus der Summe (3.1.11) und (3.1.12) nach der Verwendung Relation

$$\frac{i}{k_0-\eta_0+i\varepsilon} + \frac{i}{\eta_0-K_0+i\varepsilon} = 2\pi\,\delta(k_0-\eta_0) \qquad (3.1.13)$$

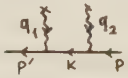
ergibt sich

$$\lim_{M\to\infty}\Big[\quad + \quad\Big] = \frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_p\cdot e_{p'}}} \qquad (3.1.14)$$

$$\times\,\bar{u}^{(e)}(\vec{P}')\left\{\int d\vec{K}\;V_1^0(\vec{P}',\vec{K})\,iS_F(\vec{K},P_0)\,V_1^0(\vec{K},\vec{P})\right\}u^{(e)}(\vec{P})$$

$\equiv$

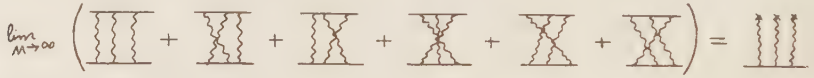
wobei $P=\beta_0 W-\eta$, $P'=\beta_0 W-\eta'$, $K=\beta_0 W-k$ ist. Statt dieser Form will ich das vier-dimensionale K-Integral in der Gleichung (3.1.14) beibehalten und will die Energie erhaltende δ-Funktion an jeden Vertex einführen. Deshalb definiere ich $V^0(q)=\frac{-ize^2\gamma^0\delta(q_0)}{(2\pi)^3 q^2}$ und schreibe für (3.1.14)



$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_p\cdot e_{p'}}}\;\bar{u}^{(e)}(\vec{P}')\left\{\int dK\;V^0(q_1)\,iS_F(K)\,V^0(q_2)\right\}u^{(e)}(\vec{P}), \qquad (3.1.15)$$

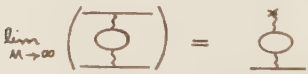
$q_1=P'-K$, $q_2=K-P$.

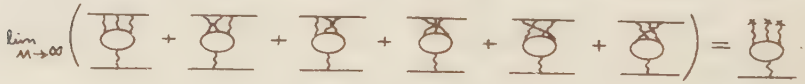
Aus (3.1.14) oder (3.1.15) folgt, daß im Limes $M \longrightarrow \infty$ die Summe des Box-Diagramms und zusammen einen physikalischen Sinn, nämlich Streuung des Elektrons im äußeren Potential in 2. Ordnung in $Z\alpha$, findet.
Außerdem habe ich im Anhang B.1 gezeigt, daß



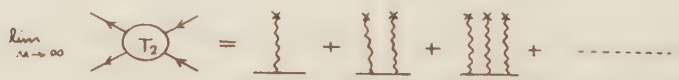
(3.1.16)

ist, was die Streuung eines Elektrons im äußeren Coulomb-Potential in 3. Ordnung in $Z\alpha$ darstellt.
Analog kann man beweisen, daß die Summe aller Skelettgraphen der Ordnung $(Z\alpha)^n$, $n \geqslant 2$, die keine Loops bzw. keine äußeren ausgetauschten Photonen enthalten (z.B. ,) zur Coulomb-Streuung der Ordnung n führen.
Für den Limes $M \rightarrow \infty$ habe ich die Renormierungsdiagramme der Kern-Linie nicht betrachtet, jedoch ist bekannt, daß nach der Renormierung der endliche Anteil des Kern- bzw. des Protonvertex wie $\frac{1}{M}$ nach Null geht[1,32]. Für die übrigen Renormierungsdiagramme kann man analog zeigen, daß z.B.

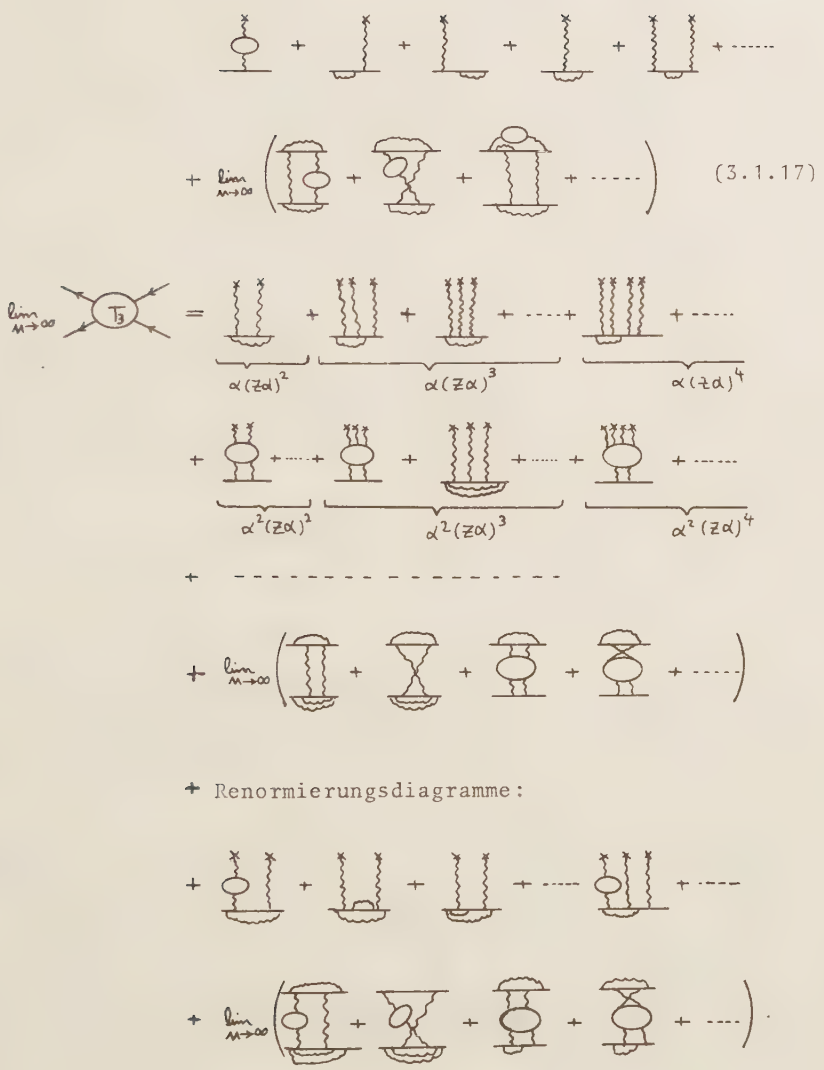




Damit ergibt sich für die T_2- und T_3-Matrix:



\+ Renormierungsdiagramme:



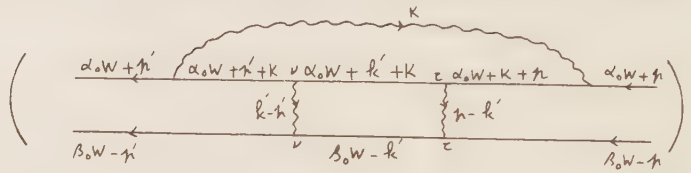
(3.1.17)

(3.1.18)

Die Terme in der T_2- und T_3-Matrix, bei denen ich den Limes $M \to \infty$ nicht durchgeführt habe, hängen mit den Diagrammen der Gruppe T_1 zusammen. Falls für $M \to \infty$ die T-Matrix nicht Null ist, hat man Korrekturen zum Coulomb-Potential, die für genügend große Z wichtiger als das Coulomb-Potential selbst wären.

Ich konnte jedoch am Beispiel zeigen (siehe Anhang B.2), daß

$$\lim_{M\to\infty}$$



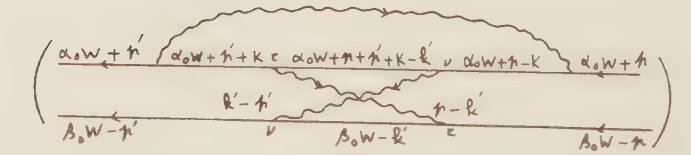
$$= \lim_{\lambda\to 0} \beta(-2e^2)\,8(i\pi^2)\,\delta^{\nu_0}\delta^{\varepsilon 0} \int d^4k' \left(-\frac{M}{c}\right)\left\{\left[\frac{\lambda^2}{2\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right.\right.$$

$$+ \frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{2c}\Bigg] \ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right) - 1$$

$$\left. - \frac{\sqrt{(\lambda^2+c)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{2c} \ln\left(\frac{-(\lambda^2+c)+\sqrt{(\lambda^2+c)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-(\lambda^2+c)-\sqrt{(\lambda^2+c)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right)\right\}$$

$$\times I^{rest}(p,p',k') \,, \qquad (3.1.19)$$

$$\lim_{M\to\infty}$$



$$= \lim_{\lambda\to 0} \beta(-2e^2)\,8(i\pi^2)\,\delta^{\nu_0}\delta^{\varepsilon 0} \int d^4k' \left(-\frac{M}{c'}\right)\left\{\left[\frac{\lambda^2}{2\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right.\right.$$

$$+ \frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{2c'}\Bigg] \ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right) - 1$$

$$\left. - \frac{\sqrt{(\lambda^2+c')^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{2c'} \ln\left(\frac{-(\lambda^2+c')+\sqrt{(\lambda^2+c')^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-(\lambda^2+c')-\sqrt{(\lambda^2+c')^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right)\right\}$$

$$\times I^{rest}(p,p',k') \qquad (3.1.20)$$

und

$$\lim_{M\to\infty}$$

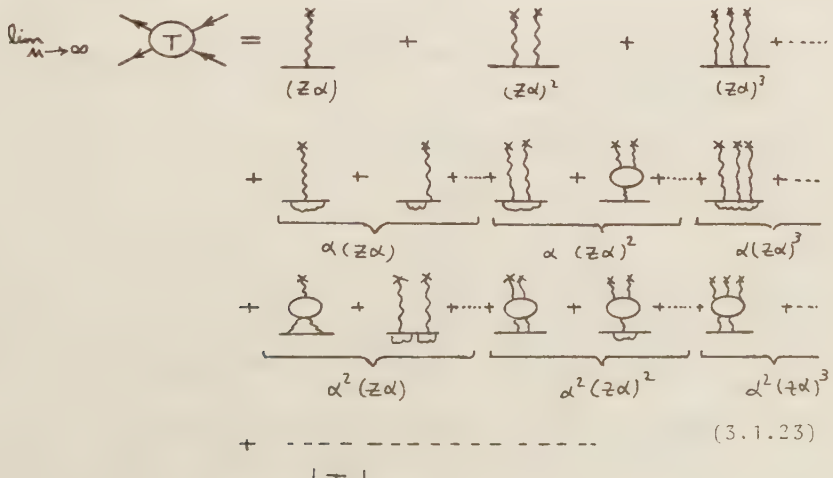
$$= 0 \qquad (3.1.21)$$

ist, wobei $c = 2M(x+s)$, $c' = 2M(-x+s')$, $x = k_0' - k_0$, $s = \frac{\vec{k}'^2 - \vec{k}^2}{2M}$, $s' = \frac{\vec{k}'^2 - (\vec{p}+\vec{k}-\vec{k}')^2}{2M}$, $a \approx M^2$ und die übrigen Funktionen A, I^{rest} sind im Anhang B.2 angegeben. Der Beweis der Gleichungen (3.1.19-21) ist ausführlich im Anhang B.2 durchgeführt. Er ist wegen der doppelten Integration $\int dk \int d^4k\, f(k,k)$ kompliziert. Außerdem sind die beiden Diagramme wegen der äußeren Photon-Linie im Falle von on-shell Teilchen (siehe 2.3) infrarot divergent, was zu zusätzlichen Komplikationen führt.
Damit sind alle Diagramme, die diese Summe als Faktor enthalten, wie z.B.

Null.
Es scheint plausibel, daß sich die übrigen Diagramme in T_1 im Limes $M \longrightarrow \infty$ auch gruppenweise wegheben und

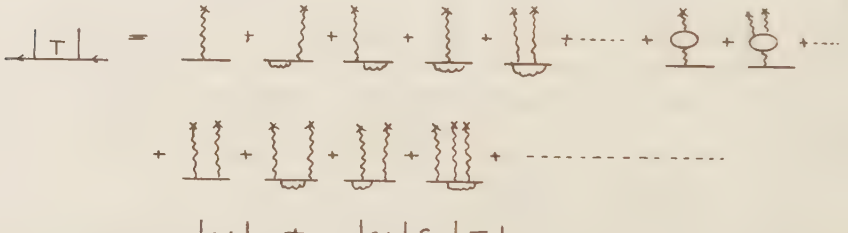
(3.1.22)

ist. Damit sind die verbleibenden Skelettdiagramme und ein Teil der Renormierungsdiagramme in der T_2- und T_3-Matrix auch Null. Deshalb schreibe ich für die T-Matrix:



(3.1.23)

Diese Gleichung ist mein erstes wichtiges Ergebnis, welches für den Limes $M \to \infty$ das äußere Potential definiert und gleichzeitig die Streuung eines Elektrons im äußeren Coulomb-Potential in beliebiger Ordnung mit den dazugehörigen Strahlungskorrekturen angibt. Es ist bemerkenswert, wie in durchaus nicht trivialer Weise (siehe etwa 3.1.15) und (3.1.21) sich das System Elektron plus schwere Ladung unter Austausch von Photonen auf die Bewegung des Elektrons in einem äußeren Potential reduziert. Da $\alpha \approx \frac{1}{137}$ eine kleine Zahl ist, lasse ich alle Terme der Ordnung $(Z\alpha)^n\ (\alpha)^m$ für $m \geq 2$ weg. Analog zu (2.2) ordne ich sie nach reduziblen und irreduziblen Graphen (hier lassen sich irreduzible Diagramme nicht durch Zerschneiden von je einer Elektronenlinie in zwei getrennte, existierende Diagramme zerlegen).



(3.1.24)

$$T(P',P) = V(P',P) + \int d^4K\, V(P',K)\, G_e(K)\, T(K,P) \cdot \qquad (3.1.25)$$

Dies ist eine Bethe-Salpeter-Gleichung (ohne äußere Beine $\bar{u}^{(e)}(\vec{p})$, $u^{(e)}(\vec{p})$ geschrieben) mit $G_e(K) = \frac{\lambda}{\gamma^0 K_0 - \vec{\gamma}\vec{K} - m + i\varepsilon} =$ Elektron-Propagator,

$$V = V_1^0 + V_{VP} + V_{SE} \,, \qquad (3.1.26a)$$

(3.1.26b)

(3.1.26c)

(3.1.26d)

wobei die off-shell Coulomb-t-Matrix durch

$T = V^{\circ} + V^{\circ} G_e T$ = + ---------- (3.1.27)

definiert ist und $V^{\circ} =$ ist. Da $V(p',p)$ proportional zu $\frac{i\delta(p_0'-p_0)\cdot\gamma^0}{(2\pi)^3}$ ist (siehe $V^{\circ}(p',p)$ in 3.1.15b), definiere ich

$$V(p',p) = \frac{-i}{(2\pi)^3}\,\delta(p_0'-p_0)\,V(\vec{p}',\vec{p}) \qquad (3.1.28a)$$

$$T(p',p) = \frac{-i}{(2\pi)^3}\,\delta(p_0'-p_0)\,T(\vec{p}',\vec{p},p_0) \qquad (3.1.28b)$$

$p_0 = E$ = Gesamtenergie des Elektrons. (3.1.28c)

Aus (3.1.28a - 28c) und (3.1.25) folgt

$$T(\vec{p}',\vec{p},E) = V(\vec{p}',\vec{p}) + \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}\; V(\vec{p}',k)\; g_e(\vec{k},E)\, T(\vec{k},\vec{p},E) \qquad (3.1.29)$$

$$g_e(\vec{k},E) = \frac{1}{\gamma^0 E - \vec{\gamma}\cdot\vec{k} - m + i\varepsilon}\,. \qquad (3.1.30)$$

Die homogene Gleichung $T = V g_e T$, zuständig für die Bindungszustände[37], läßt sich in die gesuchte verallgemeinerte Dirac-Gleichung umschreiben. Dazu definiere ich die gebundenen Zustände Ψ

$$T = V\Psi\,. \qquad (3.1.31)$$

Damit wird aus

$$\Psi = g_e V \Psi, \qquad (3.1.32)$$

$$g_e^{-1}\Psi = V\Psi \qquad (3.1.33)$$

und nach Multiplikation auf beiden Seiten vom links mit β erhält man

$$(E - \vec{\alpha}\cdot\vec{p} - \beta m)\,\Psi(\vec{p},E) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}\; V(\vec{p},\vec{k})\,\Psi(\vec{k},E), \qquad (3.1.34)$$

$$\vec{\alpha} = \beta\cdot\vec{\gamma}\,,\quad \beta = \gamma^0\,,$$

$$V(\vec{p},\vec{k}) = \beta\, V(\vec{p},\vec{k}). \qquad (3.1.35)$$

Die Gleichung (3.1.34) ist die verallgemeinerte Dirac-Gleichung im Impulsraum. Das Potential V bzw. V enthält ultraviolett divergente Anteile. Dies sind

V_{Div} =

Nach der Massen-, Ladungs- sowie Wellenfunktionsrenormierung bis zu Ordnung α heben sich die divergenten Anteile der ersten vier Diagramme gegenseitig weg, und ihre endlichen Anteile bleiben übrig. Der fünfte Term trägt nach dem Furry-Theorem nicht bei, und das letzte Diagramm, welches logarithmisch divergent ist, wird wegen der Forderung der Eichinvarianz endlich.

In diesem Zusammenhang stellt sich auch die Frage nach nichtlinearen Effekten. Ersetzt man in bzw. die Coulomb-t-Matrix durch die volle T-Matrix (3.1.25), so erhält man eine neue Gleichung für die T-Matrix, die dann jedoch nicht mehr linear in T ist.

3.2 Genäherte Propagatoren

Die Integral-Gleichung (3.1.24) bzw. (3.1.25) habe ich dadurch gewonnen, daß ich bei der Durchführung des Limes $M \longrightarrow \infty$ alle Korrekturterme der Ordnung $\frac{1}{M}, \frac{1}{M^2}, \ldots$ zum Kern-Propagator weggelassen habe. Deshalb untersuche ich nun, ob es möglich ist, von vornherein einen genäherten Propagator für die Bethe-Salpeter-Gleichung des Ausgangssystems Elektron plus schwere Ladung anzugeben, der im Limes $M \longrightarrow \infty$ eine geschlossene Gleichung liefert, die die Integral-Gleichung (3.1.24) plus die Korrekturterme des Kern-Propagators der Ordnung $\frac{1}{M}, \frac{1}{M^2}, \ldots$ enthält, d.h. ich gehe der Frage nach, ob man statt

$$T = V + V G_{BS} T \tag{3.2.1a}$$

schreiben kann

$$T = U + U g T \tag{3.2.2a}$$

$$U = V + V (G_{BS} - g) U \ , \tag{3.2.3}$$

wobei im Limes $M \longrightarrow \infty$ (3.2.3) in (3.1.26a) und (3.2.2a) in (3.1.24) plus jeweilige Korrekturen der Ordnung $\frac{1}{M}, \frac{1}{M^2}, \ldots$ übergehen soll. Dabei ist G_{BS} der volle Zwei-Teilchen-Propagator (2.2.5), g ein genäherter Propagator und V die Summe aller irreduziblen Diagramme (siehe 2.2). Ich betrachte im folgenden zwei genäherte Propagatoren.

3.2.1 Blankenbecler-Sugar-Propagator (g_{BBS})

Dieser genäherte Propagator wurde zuerst durch Blankenbecler und Sugar[38] für skalare Teilchen angegeben. Er wurde von Partovi und Lomon[39] für zwei Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen erweitert. Nach Partovi und Lomon gilt:

$$g_{BBS} = \frac{2M \cdot m\,(E_k + e_k)}{E_k \cdot e_k} \quad \frac{\delta(\alpha \varrho_k - \beta_0 E_k + k_0)}{s - (E_k + e_k)^2 + i\varepsilon} \; \Lambda^{(k)}_{(+)}(\vec{k}) \cdot \Lambda^{(e)}_{(+)}(-\vec{k}),$$

$$s = W^2 \ , \tag{3.2.4}$$

wobei $\Lambda^{(k),(e)}_{(+)}$ der positive Energieprojektor für den Kern bzw.

für das Elektron ist (siehe 3.1.8), d.h. die beiden Teilchen werden in die Nähe der positiven Massenschale gelegt.
Durch Einsetzen von (3.2.4) in (3.2.2a) und die Definitionen

$$\tilde{T}(p',p) = \bar{u}^{(k)}(\vec{p}')\,\bar{u}^{(e)}(-\vec{p}')\;T(p',p)\;u^{(k)}(\vec{p})\,u^{(e)}(-\vec{p}) \qquad (3.2.5)$$

$$\tilde{U}(p',p) = \bar{u}^{(k)}(\vec{p}')\,\bar{u}^{(e)}(-\vec{p}')\;U(p',p)\;u^{(k)}(\vec{p})\,u^{(e)}(-\vec{p}) \qquad (3.2.6)$$

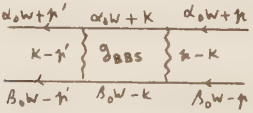
erhält man

$$\tilde{T}(p',p) = \tilde{U}(p',p) + \int d\vec{k}\;\tilde{U}(p',k)\;\frac{2Mm(E_k+e_k)}{E_k\cdot e_k}\;\frac{1}{s-(E_k+e_k)^2+i\varepsilon}\;\tilde{T}(k,p)\Big|_{k_0=\beta_0 E_k-\alpha_0 e_k} \qquad (3.2.7)$$

In nullter Näherung (Leiter-Näherung) ist $\tilde{U}=$ I und

$\tilde{T} =$ + ⋯⋯

Nun betrachte ich das Box-Diagramm



$$\sim \int d\vec{K}\;\frac{2Mm(E_k+e_k)}{E_k\cdot e_k}\;\frac{1}{s-(E_k+e_k)^2+i\varepsilon}$$

$$\times\;\frac{\left[\bar{u}(\vec{p}')\,\gamma^{\mu}\,\Lambda_{(+)}(\vec{k})\,\gamma^{\nu}u(\vec{p})\right]^{(k)}}{(\beta_0 E_k-\alpha_0 e_k-p'_0)^2-(\vec{k}-\vec{p}')^2+i\varepsilon}\;\frac{\left[\bar{u}(-\vec{p}')\,\gamma_{\mu}\,\Lambda_{(+)}(-\vec{k})\,\gamma_{\nu}\,u(-\vec{p})\right]^{(e)}}{(p_0-\beta_0 E_k+\alpha_0 e_k)^2-(\vec{p}-\vec{k})^2+i\varepsilon}\cdot \qquad (3.2.8)$$

Für festes M,m und $|\vec{k}|\to\infty$ konvergiert das Integral wie $\frac{1}{|k|^2}$.
Ich nehme an, daß dieses Integral bezüglich M gleichmäßig konvergiert, was beim Box-Diagramm (siehe 3.1) der Fall war. Deshalb vertausche ich bei der Durchführung des Limes $M\to\infty$ den Limes und die Integration. Dann gilt:

$\lim_{M\to\infty}$

$$\sim \int d\vec{K}\;\frac{m}{e_k}\;\frac{1}{e_p-e_k+i\varepsilon}\;\frac{\delta^{\mu_0}\delta^{\nu_0}}{(m-e_k-p'_0)^2-(\vec{k}-\vec{p}')^2+i\varepsilon}$$

$$\frac{\left[\bar{u}(-\vec{p}')\,\gamma_{\mu}\,\Lambda_{(+)}(-\vec{k})\,\gamma_{\nu}\,u(-\vec{p})\right]^{(e)}}{(p_0+e_k-m)^2-(\vec{p}-\vec{k})^2+i\varepsilon}\cdot \qquad (3.2.9)$$

Da für $|\vec{k}| \to \infty$ gilt

$$(\eta_0 + e_k - m)^2 - (\vec{\eta} - \vec{k})^2 + i\varepsilon \approx 2\vec{\eta}\cdot\vec{k}, \tag{3.2.10a}$$

$$(m - e_k - \eta_0)^2 - (\vec{k} - \vec{\eta}')^2 + i\varepsilon \approx 2\vec{\eta}\cdot\vec{k}, \tag{3.2.10b}$$

$$\Lambda^{(e)}_{(+)}(-\vec{k}) = \frac{1}{2m}(\gamma^0 k_0 + \vec{\gamma}\cdot\vec{k} + m) \approx \frac{\vec{\gamma}\vec{k}}{2m}, \tag{3.2.10c}$$

divergiert das K-Integral logarithmisch, d.h. im Limes $M \to \infty$ ist die Verwendung dieses Propagators nicht richtig. Man kann diese Schwierigkeit beseitigen, indem man wegen der Ausdehnung des Kerns einen Formfaktor am Kern-Vertex anbringt.

3.2.2 Gross-Propagator

In diesem Fall wird nur der Kern auf die positive Massenschale gelegt[35]. Damit ist

$$g_{cross} = \frac{M}{E_k}\,\delta(\alpha_0 W + K_0 - E_k)\,\Lambda^{(k)}_{(+)}(\vec{k})\,\frac{[\gamma(\beta_0 W - K) + m]^{(e)}}{(\beta_0 W - K)^2 - m^2 + i\varepsilon} \tag{3.2.11}$$

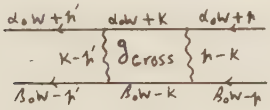
und die Gross-Gleichung lautet:

$$\hat{T}(\eta', \eta) = \hat{U}(\eta', \eta) + \int d\vec{k}\,\hat{U}(\eta', k)\,\frac{M}{E_k}\,\frac{[\gamma^0(W - E_k) + \vec{\gamma}\vec{k} + m]^{(e)}}{(W - E_k)^2 - e_k^2 + i\varepsilon}\,\hat{T}(k, \eta)\Big|_{k_0 = E_k - \alpha_0 W}, \tag{3.2.12}$$

$$\hat{T}(\eta', \eta) = \bar{u}^{(k)}(\vec{\eta}')\,T(\eta', \eta)\,u^{(k)}(\vec{\eta}), \tag{3.2.13}$$

$$\hat{U}(\eta', \eta) = \bar{u}^{(k)}(\vec{\eta}')\,U(\eta', \eta)\,u^{(k)}(\vec{\eta}), \tag{3.2.14}$$

Für das Box-Diagramm erhalte ich



$$\sim \int d\vec{K}\,\frac{[\bar{u}(\vec{\eta}')\,\gamma^\mu\,\Lambda_{(+)}(\vec{k})\,\gamma^\nu\,u(\vec{\eta})]^{(k)}}{[(E_{\eta'} - E_k)^2 - (\vec{k} - \vec{\eta}')^2 + i\varepsilon][(E_k - E_\eta)^2 - (\vec{\eta} - \vec{k})^2 + i\varepsilon]}$$

$$\frac{M}{E_k}\left[\gamma_\mu\,\frac{\gamma^0(W - E_k) + \vec{\gamma}\cdot\vec{k} + m}{(W - E_k)^2 - e_k^2 + i\varepsilon}\,\gamma_\nu\right]^{(e)}. \tag{3.2.15}$$

Hier erkennt man, daß für jede beliebige M das Integral für $|\vec{k}| \to \infty$ linear divergiert. Deshalb fordert Gross, einen Formfaktor am Kern-Vertex anzubringen, d.h. die Verwendung dieses

Propagators ohne Formfaktor ist auch nicht richtig.

Für Punktteilchen ist die Benutzung dieser genäherten Propagatoren im Limes $M \to \infty$ nicht richtig, da entsprechende K-Integrale divergieren. Dagegen ist sie für den Kern richtig, wo man wegen der Ausdehnung des Kerns einen Formfaktor (siehe Abschnitt 3.3) am Kern-Vertex anbringen kann (man muß beachten, daß sich dieser Formfaktor im Falle g_{Gross} für $M \to \infty$ mindestens wie $\frac{1}{k^2}$ verhalten muß). Man kann nicht ausschließen, daß es einen genäherten Propagator, der im Limes $M \to \infty$ sowohl für Punktteilchen als auch für den Kern anwendbar ist, gibt. Ich habe einen solchen allerdings nicht gefunden.

Bei der Durchführung des Limes $M \to \infty$ in der Gleichung (3.2.2a) muß man dies für g und U tun. U enthält alle Diagramme der Ordnung $Z^{\ell} \alpha^{m} (Z\alpha)^{n}$ $(\ell, m \geq 0,\ n \geq 1)$ und deshalb kommen Diagramme der Art

vor, für welche man, wie bereits erwähnt, zeigen muß, daß sie im Limes $M \to \infty$ verschwinden, d.h. die Benutzung eines genäherten Propagators, falls ein solcher existiert, führt nicht zu Vereinfachungen.

3.3 Formfaktor zur Ladungsverteilung des Kerns

Die Sommerfeld'sche Feinstrukturformel[1] für die gebundenen Zustände wird für $Z\alpha > 1$ ungültig. Z.B. ist die Grundzustandsenergie $E_{1s_{1/2}} = \sqrt{1-(z\alpha)^2}$ und sie wird für $Z\alpha > 1$ imaginär. Dies weist darauf hin, daß entsprechende Zustände nicht auftreten. Diese Schlußfolgerung ist jedoch nur für eine Punktladung richtig und für einen ausgedehnten Kern, wie er in der Natur vorkommt, nicht anwendbar. Die Berücksichtigung der endlichen Kernausdehnung führt dazu, daß gebundene Zustände für $Z\alpha > 1$ auftreten Können[4], welche für ein bestimmtes $Z=Z_c$ die obere Grenze des negativen Kontinuums erreichen. Einen Kern mit endlicher Dimension beschreibe ich durch eine Ladungsverteilung der Form

$$\rho(\vec{r}) = -ze\, f(r), \tag{3.3.1}$$

wobei $f(r)$ die Ausdehnung der Ladungsverteilung des Kerns beschreibt. Es gilt die Normierung:

$$-ze = \int d\vec{r}\, \rho(\vec{r}) = -4\pi ze \int_0^\infty dr\, r^2 f(r) \tag{3.3.2}$$

Im Impulsraum erhalte ich für $\rho(\vec{r})$ den Formfaktor

$$F_1(q) = \int d\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\vec{r}}\, \rho(\vec{r}) \equiv -ze\, F(q), \quad q = |\vec{q}| \tag{3.3.3}$$

Aus (3.3.2) und (3.3.3) folgt

$$F_1(0) = -ze, \quad F(0) = 1 \tag{3.3.4}$$

Aus der Poisson-Gleichung für eine statische Ladungsverteilung

$$\Delta\Phi(\vec{r}) = -\rho(\vec{r}) = ze\, f(r), \tag{3.3.5a}$$

wobei $\Phi(\vec{r})$ das Potential des Kerns ist, erhält man

$$\Phi(q) = \int d\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \Phi(\vec{r}) = \frac{1}{q^2} \int d\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\vec{r}}\, \rho(\vec{r}) = \frac{F_1(q)}{q^2} = \frac{-ze\,F(q)}{q^2} \tag{3.3.6a}$$

Damit ist die Wechselwirkung zwischen dem ausgedehnten Kern und dem Elektron

$$V(q) = e\Phi(q) = \frac{e}{q^2} \int d\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \rho(\vec{r}) = \frac{-|e|\,F_1(q)}{q^2}, \quad e<0 \tag{3.3.6b}$$

$V(\vec{r})$ erfüllt die Poisson-Gleichung:

$$\Delta V(\vec{r}) = -e\,\rho(\vec{r}) \tag{3.3.5b}$$

Nun wende ich mich dem speziellen Fall $V(q) = V^{\circ}(q) \equiv \frac{-Ze^2}{q^2} F^{\circ}(q)$ zu (reine Coulomb-Wechselwirkung). Für diesen folgt aus (3.3.6a), daß für die Punktladung $F^{\circ}(q)=1$ ist. Jetzt betrachte ich den Kern als Kugel mit dem Radius R und wähle für seine Ladungsverteilung zwei Modelle. Für Modell I nehme ich an, daß die Ladung auf der Oberfläche der Kugel mit konstanter Ladungsdichte verteilt ist. Für diesen Fall ist

$$\rho(\vec{r}) = \frac{(-Ze)}{4\pi R^2}\,\delta(r-R) \tag{3.3.7}$$

Aus (3.3.7) und (3.3.3) erhalte ich

$$F^{\circ}(q) = \frac{\sin qR}{qR} \tag{3.3.8}$$

$$V^{\circ}(q) = -\frac{Ze^2}{q^2}\,\frac{\sin qR}{qR} \tag{3.3.9}$$

was im Ortsraum dem Potential

$$V_c(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi}\begin{cases} \frac{1}{R} & r \le R \\ \frac{1}{r} & r \ge R \end{cases} \tag{3.3.10}$$

entspricht. In Modell II nehme ich an, daß die Ladungsdichte im Inneren der Kugel konstant ist. Dann gilt:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{3(-Ze)}{4\pi R^3}\,\theta(R-r) \tag{3.3.11}$$

Analog erhalte ich für F° und V°

$$F^{\circ}(q) = \frac{3}{R^3}\left[\frac{\sin qR}{q^3} - \frac{R\cos qR}{q^2}\right] \tag{3.3.12}$$

$$V^{\circ}(q) = -\frac{Ze^2}{q^2}\,\frac{3}{(qR)^3}\left[\sin qR - qR\cos qR\right] \tag{3.3.13}$$

und im Ortsraum ist

$$V_c(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi}\begin{cases} \frac{1}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R^2}\right) & r \le R \\ \frac{1}{r} & r \ge R \end{cases} \tag{3.3.14}$$

Um die Ausdehnung des Kerns im folgenden Kapitel zu berücksichtigen, ersetze ich -Ze durch $-Ze\,F^{\circ}(q)$. Für Modell I ist $F^{\circ}(q)$ durch (3.3.8) und für Modell II ist $F^{\circ}(q)$ durch (3.3.12) gegeben.

4. Vakuum-Polarisationspotential

Hier wird zunächst die Summe aller Vakuum-Polarisationsdiagramme durch die relativistische Greensfunktion $G(\vec{x},\vec{x},\omega)$ bzw. durch die induzierte Vakuum-Polarisationsladungsdichte $\rho_{VP}(\vec{x})$ dargestellt. Nach der Partialwellenzerlegung von G wird ρ_{VP} durch die radiale Greensfunktion $G_R(r,r,\omega)$, welche durch die radialen Lösungen der Dirac-Gleichung im Coulomb-Feld des Kerns gegeben ist, ausgedrückt.

4.1 Darstellung des Vakuum-Polarisationspotentials durch $G(\vec{x},\vec{x},\omega)$ bzw. $\rho_{VP}(\vec{x})$.

Man kann versuchen, die Coulomb-t-Matrix (siehe 3.1.27):

$$t(\vec{q}',\vec{q},q_0) = \frac{(-ze^2)\gamma^0}{(\vec{q}'-\vec{q})^2-i\varepsilon} + \frac{(-ze^2)\gamma^0}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}\ \frac{1}{(\vec{q}'-\vec{k})^2-i\varepsilon}\ \frac{\gamma^0 q_0-\vec{\gamma}\cdot\vec{k}+m}{q_0^2-\vec{k}^2-m^2+i\varepsilon}\ t(\vec{k},\vec{q},q_0). \tag{4.1.1}$$

die im Potential

$$V_{VP}(P',P) = \quad \sim \frac{\gamma^\nu \delta(P_0'-P_0)}{(\vec{P}'-\vec{P})^2-i\varepsilon}\int d^4K_1\ Sp\left[S_F(P'+K_1)\,t(P'+K_1,K_1+P)\,S_F(K_1+P)\,\gamma_\nu\right] \tag{4.1.2}$$

enthalten ist, numerisch zu lösen und damit V_{VP} zu errechnen. Aus der Gleichung (4.1.1) ist ersichtlich, daß das Integral in (4.1.1) für den Fall $\vec{k}=\vec{q}'$, $|\vec{q}|=\sqrt{q_0^2-m^2}$ (on-shell) nicht existiert. Um das besser zu sehen, setze ich in (4.1.1) $q_0=\sqrt{\vec{q}'^2+m^2}$ und nach der Transformation $\vec{k}=\vec{q}'-\vec{k}'$ folgt

$$t(\vec{q}',q,\sqrt{m^2+\vec{q}'^2}) = \frac{(-ze^2)\gamma^0}{(\vec{q}'-\vec{q})^2+i\varepsilon} + \frac{(-ze^2)\gamma^0}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}'\ \frac{1}{\vec{k}'^2-i\varepsilon}\ \frac{\gamma^0 q_0-\vec{\gamma}(\vec{q}'-\vec{k}')}{\vec{k}'\cdot(2\vec{q}'-\vec{k}')+i\varepsilon} \times t(\vec{q}'-\vec{k}',q,\sqrt{m^2+\vec{q}'^2}). \tag{4.1.3}$$

Hier sieht man, daß die Singularitäten vom Coulomb-Potential und vom Elektronenpropagator aufeinander und auf der unteren Integrationsgrenze liegen. Das gleiche gilt für den Fall $\vec{k}=\vec{q}$, $|\vec{q}|=\sqrt{q_0^2-m^2}$. D.h. das on-shell-limit der off-shell Coulomb-t-Matrix existiert nicht. (Für den nichtrelativistischen

Fall siehe Literatur 40-47)

Die Ursache für dieses anormale on-shell Verhalten der Coulomb-t-Matrix ist die Langreichweitigkeit des Coulomb-Potentials. Diese Schwierigkeit kann beseitigt werden, indem man das Coulomb-Potential durch ein abgeschirmtes Potential $\frac{1}{(\vec{q}'-\vec{q})^2+\lambda^2}$ (λ-Abschirmungsparameter) ersetzt. Für numerische Zwecke ist dieses Verfahren nicht günstig, da λ gegen Null variiert werden muß. Aufgrund dessen möchte ich V_{VP} nicht auf diese Weise errechnen, sondern werde versuchen, V_{VP} durch die relativistische Greensfunktion $G(\vec{x},\vec{x},\omega)$ bzw. durch die induzierte Vakuum-Polarisationsladungsdichte $\rho_{VP}(\vec{x})$ darzustellen, da die radialen Greensfunktionen $G_\kappa(|\vec{x}|,|\vec{x}|,\omega)$ analytisch bekannt sind (siehe Anhang D und Abschnitt 3.3).

Für V_{VP} schreibe ich (siehe 3.1.2.6c):

$$V_{VP}(p',p) = \sum_{n=0}^{\infty} V_{VP}^{(n)}(p',p), \qquad (4.1.4)$$

$$V_{VP}^{0}(p',p) = \quad = \frac{(e\gamma^\nu)}{(p'-p)^2}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4} Sp\left[S_F(k+p')(e\gamma_\nu)\right]\delta^4(p'-p)$$

$$V_{VP}^{(1)}(p',p) = \quad = \frac{(e\gamma^\nu)}{(p'-p)^2}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4} Sp\left[S_F(k+p')\,V_2^0(p'-p)\,S_F(k+p)\,(e\gamma_\nu)\right]$$

$$V_{VP}^{(2)}(p',p) = \quad = \frac{(e\gamma^\nu)}{(p'-p)^2}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4} Sp\left[S_F(k+p')\,V_2^0(p'-k')\,S_F(k+k')\,V_2^0(k'-p)\,S_F(k+p)\,(e\gamma_\nu)\right]$$

$$V_{VP}^{(3)}(p',p) = \quad = \text{----------}$$

mit $V_2^0(q) = \lambda\, v^0(q) F^0(q) = \frac{Z e^2 \delta^0 \delta(q_0)}{(2\pi)^3 q^2} F^0(q)$. $F^0(q)$ ist der Formfaktor aufgrund der Ausdehnung des Kerns (siehe Abschnitt 3.3) und $S_F(p) = \frac{\gamma p + m}{p^2 - m^2 + i\varepsilon}$ der freie Feynman-Propagator. Obwohl nach dem Furry-Theorem $V_{VP}^{(n)}$, $n = 0,2,4,\ldots$ Null ist, nehme ich diese Terme mit, um eine vollständige Summe von allen Vakuum-Polarisationsdiagrammen in (4.1.4) zu haben. Nach der Summation von allen

Diagrammen ergibt sich:

$$\mathcal{V}_{\nu\rho}(p',p) = \frac{(e\gamma^\nu)}{(p'-p)^2}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\,\mathrm{Sp}\Big\{S_F(k+p')\Big[\delta^{(4)}(p'-p)+\Big(\mathcal{V}_2^\circ(p'-p)$$

$$+\int d^4k'\,\mathcal{V}_2^\circ(p'-k')\,S_F(k+k')\,\mathcal{V}_2^\circ(k'-p)+\cdots\cdots\Big)S_F(k+p)\Big](e\gamma_\nu)\Big\}$$

$$\equiv \frac{(e\gamma^\nu)}{(p'-p)^2}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\,\mathrm{Sp}\left[S^c(k+p',k+p)(e\gamma_\nu)\right] \qquad (4.1.5)$$

$\equiv$,

$$S^c(k+p',k+p) = S_F(k+p')\,\delta^{(4)}(p'-p) + S_F(k+p')\,\mathcal{V}_2^\circ(p'-p)\,S_F(k+p)+\cdots\cdots$$

$$= S_F(k+p')\,\delta^{(4)}(p'-p) + S_F(k+p')\int d^4k'\,\mathcal{V}_2^\circ(k+p'-k')\,S^c(k',k+p)$$

$\equiv$ =

= . (4.1.6)

Da $\mathcal{V}_2^\circ(q) = \frac{ze^2\gamma^\circ\delta(q_0)F^\circ(q)}{(2\pi)^3 q^2} = \frac{(-ze^2)\gamma^\circ\delta(q_0)F^\circ(q)}{(2\pi)^3\,\vec{q}^{\,2}} \equiv \mathcal{V}_1^\circ(\vec{q})\,\delta(q_0)$ ist, kann man schreiben

$$S^c(k+p',k+p) = \delta(p_0'-p_0)\left[S_F(k+p')\,\delta(\vec{p}'-\vec{p}) + S_F(k+p')\,\mathcal{V}_1^\circ(\vec{p}'-\vec{p})\,S_F(k+p')+\cdots\right]$$

$$\equiv \delta(p_0'-p_0)\,G_1(\vec{k}+\vec{p}',\vec{k}+\vec{p},k_0+p_0)\,. \qquad (4.1.7)$$

Damit ist

$$\mathcal{V}_{\nu\rho}(p',p) = \frac{(e\gamma^\nu)\,\delta(p_0'-p_0)}{(p'-p)^2}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\,\mathrm{Sp}\left[G_1(\vec{k}+\vec{p}',\vec{k}+\vec{p},k_0+p_0)\,(e\gamma_\nu)\right]. \qquad (4.1.8)$$

Wie schon in (3.1) erwähnt, enthält $\mathcal{V}_{\nu\rho}(p',p)$ die divergenten Teile und (abgesehen von den Termen $\mathcal{V}^\circ_{\nu\rho}(p,k)$ und $\mathcal{V}^{(1)}_{\nu\rho}(p,k)$, welche wegen des Furry-Theorems Null sind). Das bedeutet, daß das Integral in (4.1.5) bzw. in (4.1.8) nicht endlich ist, und damit bleibt $\mathcal{V}_{\nu\rho}(p',p)$ unbestimmt. Das divergente K-Integral wird endlich, wenn man es bei hohen Frequenzen (K) abschneidet

(Pauli-Villars-Verfahren[48]), d.h. man ersetzt G_1 durch den regularisierten Ausdruck

$$G_1^R = G_1(m) - G_1(m_1),$$

wobei $G_1(m) \equiv G_1(k+p', k+p, k_0+\beta)$ ist. Die Hilfsmasse m_1 wird nur als mathematischer Parameter benutzt. Nach der Ladungsrenormierung läßt man $m_1 \to \infty$ gehen und erhält ein endliches eichinvariantes Resultat für ν_{vp} (als Beispiel siehe Bjorken und Drell[1] Abschnitt 8.2, wo man das Diagramm mit diesem Verfahren behandelt).

Im folgenden werde ich annehmen, daß G_1 bereits regularisiert ist. Nun möchte ich zeigen, daß S^c der relativistischen Greensfunktion des Elektrons im Coulomb-Feld des ausgedehnten Kerns entspricht. Dazu multipliziere ich die Gleichung (4.1.6) von links mit $[S_F(q')]^{-1} = \gamma q' - m$, $q' = k+p'$. So erhält man die Gleichung

$$(\gamma q' - m) S^c(q',q) = \delta^{(4)}(q'-q) + \int d^4k' V_2^0(q'-k') S^c(k',q). \quad (4.1.9)$$

Dies schreibt sich im Ortsraum

$$[i\gamma^\mu \partial'_\mu - \beta V_c(|\vec{x}'|) - m] S^c(x',x) = \delta^{(4)}(x'-x), \quad (4.1.10)$$

wobei $V_c(|\vec{x}'|)$ in (3.3.10) bzw. in (3.3.14) definiert ist, d.h. $S^c(x',x)$ ist eine zeitabhängige Greensfunktion zum Dirac-Operator $(i\gamma^\mu \partial'_\mu - \beta V_c(|\vec{x}'|) - m)$, und sie unterliegt bestimmten Randbedingungen, welche durch die Gleichung (4.1.6) festgelegt sind. Der Zusammenhang zwischen den Darstellungen ist gegeben durch:

$$S^c(x',x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q' \int d^4q \; e^{-ix'q'} S^c(q',q) e^{iqx}. \quad (4.1.11)$$

Die Greensfunktion $S^c(x',x)$ ist eine Funktion von der Differenz $\tau = x'_0 - x_0$. Um das zu zeigen, setze ich (4.1.7) in (4.1.11) ein. Dann ist:

$$S^c(x',x) = \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{+\infty} dq'_0 \, e^{-iq'_0(x'_0-x_0)} \, \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q}' \int d\vec{q} \; e^{i\vec{x}\vec{q}'} G_1(\vec{q}',\vec{q},q'_0) e^{-i\vec{q}\vec{x}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{+\infty} dq'_0 \, e^{-iq'_0(x'_0-x_0)} \, G_1(\vec{x}',\vec{x},q'_0) \quad (4.1.12)$$

oder

$$S^c(\vec{x}',\vec{x},\tau)\gamma^0 = \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, e^{-i\omega\tau} \, G(\vec{x}',\vec{x},\omega), \quad (4.1.13)$$

wobei $G(\vec{x}',\vec{x},q_0') = -G_1(\vec{x}',\vec{x},q_0')\gamma^0$ ist, und die Gleichung

$$(-\omega - i\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}_{x'} + V_e(|\vec{x}'|) + \beta m)\, G(\vec{x}',\vec{x},\omega) = \delta(\vec{x}'-\vec{x}) \tag{4.1.14}$$

erfüllt, d.h. $G(\vec{x}',\vec{x},\omega)$ ist eine zeitunabhängige Greensfunktion zum Dirac-Operator $(-\omega - i\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}_{x'} + V_e(|\vec{x}'|) + \beta m)$, und sie unterliegt denselben Randbedingungen wie S^e. Aus (4.1.8), (4.1.11) und (4.1.13) ergibt sich:

$$V_{vp}(p',p) = \frac{(-e\gamma^\nu)\,\delta(q_0)}{q^2}\int\frac{d\vec{x}}{(2\pi)^3}\, e^{-i\vec{x}\vec{q}}\,\frac{1}{(2\pi)}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\; sp\left[G(\vec{x},\vec{x},\omega)(e\gamma^0\gamma_\nu)\right]$$

$$\equiv \frac{-i\gamma^0}{(2\pi)^3}\,\delta(q_0)\,V_{vp}(\vec{p}',\vec{p}), \tag{4.1.15}$$

$$q = p'-p,$$

$$V_{vp}(\vec{p}',\vec{p}) = \frac{ie}{\vec{q}^2}(\gamma^0\gamma^\nu)\int d\vec{x}\; e^{-i\vec{x}\vec{q}}\;\frac{1}{(2\pi)}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\; sp\left[G(x,x,\omega)(e\gamma^0\gamma_\nu)\right]$$

$$\equiv \frac{-|e|}{\vec{q}^2}\,F'(|\vec{q}|). \tag{4.1.16a}$$

Dies ist das Potential, das zur Wechselwirkung der verallgemeinerten Dirac-Gleichung (3.1.34) gehört. Nach der Poisson-Gleichung (3.3.6b) wird dieses Potential durch eine Ladungsdichte $\rho_{vp}(\vec{x})$ bewirkt. Aus dem Vergleich von (4.1.16a) und (3.3.6b) folgt:

$$F'(|\vec{q}|) = \frac{i\gamma^0\gamma^\nu}{2\pi}\int d\vec{x}\; e^{-i\vec{x}\cdot\vec{q}}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\; sp\left[G(\vec{x},\vec{x},\omega)(e\gamma^0\gamma_\nu)\right]$$

$$\equiv \int d\vec{x}\; e^{-i\vec{x}\cdot\vec{q}}\;\rho_{vp}(\vec{x}), \tag{4.1.17}$$

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = \frac{|e|\,(\gamma^0\gamma^\nu)}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\; sp\left[G(\vec{x},\vec{x},\omega)(\gamma^0\gamma_\nu)\right] \tag{4.1.18a}$$

und damit ist

$$V_{vp}(\vec{p}',\vec{p}) = \frac{-|e|}{\vec{q}^2}\int d\vec{x}\; e^{-i\vec{x}\vec{q}}\;\rho_{vp}(\vec{x}) \tag{4.1.16b}$$

Man kann auch auf ganz andere Weise einen Zugang zu $\rho_{\nu\rho}(\vec{x})$ finden. Dazu geht man von der Quantisierung des Elektron-Positron- Felds $\hat{\Psi}(x)$ (Dirac-Feld) im Coulomb-Potential eines ausgedehnten Kerns der Ladung $-Ze > 0$ aus. Das Dirac-Feld $\hat{\Psi}(x)$ erfüllt die Gleichung

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - \beta V_c(|\vec{x}|) - m)\hat{\Psi}(x) = 0, \tag{4.1.19}$$

wobei $V_c(|\vec{x}|)$ in (4.1.10) definiert ist. Für die Quantisierung entwickelt man den Feldoperator $\hat{\Psi}(x)$ nach dem vollständigen Satz von Lösungen $\Phi_{E_n}(x)$ des entsprechenden Dirac-Operators

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{E_{n_1}} a_{n_1} \Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})\, e^{-iE_{n_1}x_0} + \sum_{E_{n_2}} b^+_{n_2} \Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})\, e^{-iE_{n_2}x_0}. \tag{4.1.20}$$

Da hier $V_c(|\vec{x}|)$ ein attraktives Potential ist, bedeutet $\sum_{E_{n_1}}$ die Summe über alle Elektronenzustände (d.h. die Summe über das diskrete Spektrum $-m \leqslant E_{n_1} < m$ und das Integral über das positive Kontinuum $E_{n_1} \geqslant m$), und $\sum_{E_{n_2}}$ kennzeichnet die Summe über alle Positronenzustände (d.h. das Integral über das negative Kontinuum $E_{n_2} < -m$). Analog zum freien Feld interpretiert man a_{n_1} als Vernichtungsoperator des Elektrons und $b^+_{n_2}$ als Erzeugungsoperator des Positrons. Diese und der Feldoperator gehorchen den Antikommutator-Relationen:

$$\left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\bar{\Psi}}(x')\right\}_{x_0 = x_0'} = \gamma^0 \delta(\vec{x}' - \vec{x}), \quad \left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')\right\} = 0 = \left\{\hat{\bar{\Psi}}(x), \hat{\bar{\Psi}}(x')\right\} \tag{4.1.21a}$$

$$\left\{a_n, a^+_{n'}\right\} = \delta_{nn'}, \quad \left\{b_n, b^+_{n'}\right\} = \delta_{nn'}, \tag{4.1.21b}$$

$$\left\{a_n, a_{n'}\right\} = \left\{b_n, b_{n'}\right\} = \left\{a^+_n, a^+_{n'}\right\} = \left\{b^+_n, b^+_{n'}\right\} = 0. \tag{4.1.21c}$$

Dann definiert man den Vakuumzustand $|0\rangle$ als Zustand mit

$$a_{n_1}|0\rangle = b_{n_2}|0\rangle = 0 \tag{4.1.22}$$

(d.h. unter dem Vakuum will man sowohl die Abwesenheit von Elektronen als auch von Positronen verstehen).

Der Stromoperator ist gegeben durch:

$$j_\nu(x) = \frac{-|e|}{2} (\gamma_\nu)_{\alpha\beta} \left[\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta(x)\right] . \tag{4.1.23}$$

Den Vakuumerwartungswert von j_ν kann man[49] mit dem relativistischen Feynman-Propagator[1]:

$$\left(S_F(x',x)\right)_{\beta\alpha} = -i \langle 0|\hat{\psi}_\beta(x')\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x)|0\rangle \theta(x'_0-x_0) + i\langle 0|\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta(x')|0\rangle \theta(x_0-x'_0) \tag{4.1.24}$$

in Zusammenhang bringen. Dazu schreibt man:

$$\left(S_F(x',x)\right)_{\beta\alpha}\Big|_{x\to x'} \longrightarrow -i\langle 0|\hat{\psi}_\beta(x)\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x)|0\rangle\Big|_{x'_0\to x_0+\delta}, \quad \delta>0 \tag{4.1.25}$$

$$\left(S_F(x',x)\right)_{\beta\alpha}\Big|_{x\to x'} \longrightarrow i\langle 0|\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta(x)|0\rangle\Big|_{x'_0\to x_0-\delta}, \quad \delta>0 \tag{4.1.26}$$

oder

$$\lim_{x\to x'} \left(S_F(x',x)\right)_{\beta\alpha} = \frac{i}{2}\langle 0|\left[\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta(x)\right]|0\rangle, \tag{4.1.27}$$

wobei Limes $X \to X'$ bedeutet, daß man den Mittelwert der Fälle $X' > X$ und $X' < X$ zu nehmen hat. Aus (4.1.23) und (4.1.27) ergibt sich

$$\langle 0|j_\nu(x)|0\rangle = \lim_{x\to x'} i|e|(\gamma_\nu)_{\alpha\beta}\left(S_F(x',x)\right)_{\beta\alpha} = \lim_{x\to x'} i|e|\,\mathrm{sp}\left[S_F(x',x)\gamma_\nu\right]. \tag{4.1.28}$$

Durch die Anwendung des Dirac-Operators $(i\gamma^\mu\partial'_\mu - \beta V_c(|\vec{x}|) - m)$ auf die Gleichung (4.1.24) und die Verwendung der Gleichungen (4.1.19) und (4.1.21a) erhält man (in Matrix-Schreibweise):

$$\left(i\gamma^\mu\partial'_\mu - \beta V_c(|\vec{x}|) - m\right) S_F(x',x) = \delta^{(4)}(x'-x) . \tag{4.1.29}$$

Dies schreibt sich im Impulsraum

$$(\not{q}' - m) S_F(q',q) = \delta^{(4)}(q'-q) + \int d^4k' \, V_2^0(q'-k') S_F(k',q) . \tag{4.1.30}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} S_F(q',q) &= S_F(q')\,\delta^{(4)}(q'-q) + S_F(q')\int d^4k'\, V_2^0(q'-k') S_F(k',q) \\ &= S_F(q')\,\delta^{(4)}(q'-q) + S_F(q')\, V_2^0(q'-q)\, S_F(q) + \cdots\cdots \\ &= \longleftarrow + \text{ } + \text{} + \cdots\cdots\cdots \end{aligned} \tag{4.1.31}$$

D.h. $S_F(q',q)$ hat dieselbe Streureihe wie $S^c(q',q)$ (siehe 4.1.6) und deshalb ist $S_F(q',q) = S^c(q',q)$ bzw. $S_F(x',x) = S^c(x',x)$. Wegen der Relationen (4.1.13) und (4.1.28) kann man schreiben

$$\langle 0|j_\nu(x)|0\rangle = \lim_{x\to x'} \frac{|e|}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\ e^{-i\omega\tau}\ Sp\left[G(\vec{x},\vec{x},\omega)(\gamma^0\gamma^\nu)\right] \quad (4.1.32)$$

Für regularisierte G darf man den Limes und die Integration vertauschen. Dann gilt:

$$\langle 0|j_\nu(\vec{x})|0\rangle = \frac{|e|}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\ Sp\left[G(\vec{x},\vec{x},\omega)(\gamma^0\gamma^\nu)\right]. \quad (4.1.33)$$

Aus (4.1.33) und (4.1.18a) ergibt sich:

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = (\gamma^0\gamma^\nu)\langle 0|j_\nu(\vec{x})|0\rangle. \quad (4.1.34a)$$

Da nur die zeitartige Komponente von $\langle 0|j_\nu(x)|0\rangle$ ungleich Null ist[15], folgt:

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = \langle 0|j_0(\vec{x})|0\rangle = \rho_{Vakuum}. \quad (4.1.34b)$$

Damit trägt nur $\nu=0$ in der Gleichung (4.1.18a) bei und ich schreibe

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = \frac{|e|}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\ Sp\left[G(\vec{x},\vec{x},\omega)\right]. \quad (4.1.18b)$$

Aus (4.1.34b), (4.1.25) und (4.1.20) folgt

$$\begin{aligned}\rho_{vp}(\vec{x}) &= -\frac{|e|}{2}(\gamma_0)_{\alpha\beta}\langle 0|\left[\tfrac{1}{\Psi}_\alpha(x), \Psi_\beta(x)\right]|0\rangle \\ &= -|e|\sum_{E_{n_1}E_{n_1'}} \langle 0|a^\dagger_{n_1'}a_{n_1}|0\rangle\ Sp\left(\gamma_0 \Phi^{(+)}_{E_{n_1'}}(\vec{x})\bar{\Phi}^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})\right) e^{\frac{i}{\hbar}x_0(E_{n_1}-E_{n_1'})} \\ &\quad + |e|\sum_{E_{n_2}E_{n_2'}} \langle 0|b^\dagger_{n_2'}b_{n_2}|0\rangle\ Sp\left(\gamma_0 \Phi^{(-)}_{E_{n_2'}}(\vec{x})\bar{\Phi}^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})\right) e^{\frac{i}{\hbar}x_0(E_{n_2}-E_{n_2'})} \\ &\quad + \frac{|e|}{2}\left[\sum_{E_{n_1}} Sp\left(\gamma_0\Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})\bar{\Phi}^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})\right) - \sum_{E_{n_2}} Sp\left(\gamma_0\Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})\bar{\Phi}^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})\right)\right].\end{aligned} \quad (4.1.35)$$

Mit unserer Definition für das Vakuum (siehe 4.1.22) ist

$$\langle 0|a^\dagger_{n_1'}a_{n_1}|0\rangle = 0 = \langle 0|b^\dagger_{n_2'}b_{n_2}|0\rangle \quad (4.1.36)$$

und es gilt

$$\rho_{VP}(\vec{x}) = \frac{|e|}{2}\left\{\sum_{E_{n_1}} Sp(\gamma_0 \Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})\,\Phi^{\dagger(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})\gamma^0) - \sum_{E_{n_2}} sp(\gamma_0 \Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})\,\Phi^{\dagger(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})\gamma^0)\right\}$$

oder (4.1.37)

$$\rho_{VP}(\vec{x}) = \frac{|e|}{2}\left\{\sum_{E_{n_1}} |\Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})|^2 - \sum_{E_{n_2}} |\Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})|^2\right\}. \quad (4.1.38)$$

In Abwesenheit des äußeren Potentials (Z=0) ist $\rho_{VP}(X)=0$, da in diesem Fall gelten

$$\sum \longrightarrow \sum_{\lambda} \int dp$$

$$\Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x}) \longrightarrow \Psi^{(+)}_{p,\lambda}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sqrt{\frac{m+e_p}{2m}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{e_p+m}\end{pmatrix}|\lambda\rangle e^{i\vec{p}\vec{x}} \equiv u_\lambda(\vec{p})\frac{e^{i\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (4.1.39)$$

$$\Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x}) \longrightarrow \Psi^{(-)}_{p,\lambda}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sqrt{\frac{m+e_p}{2m}}\begin{pmatrix} \frac{-\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{e_p+m} \\ 1\end{pmatrix}|\lambda\rangle e^{-i\vec{p}\vec{x}} \equiv v_\lambda(\vec{p})\frac{e^{-i\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (4.1.40)$$

und damit ist

$$\rho^{Phys.}_{VP}(\vec{x}) = \frac{|e|}{2}\int\frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda}\left[u^{\dagger}_\lambda(\vec{p})u_\lambda(\vec{p}) - v^{\dagger}_\lambda(-\vec{p})v_\lambda(-\vec{p})\right] = 0, \quad (4.1.41)$$

wobei $e_p=\sqrt{m^2+\vec{p}^2}$, $|\lambda\rangle$ der Helizitätspinor (siehe Anhang A)ist. D.h. im freien Fall ist die Teilchendichte $|\Phi_E|^2$ für Elektronen und für Positronen gleich. Diese Gleichheit wird in Anwesenheit eines Kerns der Ladungszahl -Ze > 0 aufgehoben, da die Elektronen ein anderes Potential als die Positronen spüren; die Elektronen spüren ein attraktives und die Positronen ein repulsives Potential. Deshalb bilden die Elektronen eine Wolke um den Kern, wogegen die Positronen vom Kern abgestoßen werden. Infolgedessen ist die Teilchendichte am Punkt X (bei X=0 liegt der Kern) für Elektronen und Positronen nicht gleich und es gilt:

$$\rho_{VP}(\vec{x}) \neq 0, \quad (4.1.42)$$

d.h. wegen des äußeren Potentials (Kern) wird im Vakuum eine Ladungsdichte induziert (Polarisation des Vakuums). Trotzdem bleibt die Gesamtladung des Vakuums gleich Null:

$$Q_{Vakuum} = \int d\vec{x}\ \rho_{vp}(\vec{x}) = 0 = F(0) \qquad (4.1.43)$$

(da wegen der Integration über den ganzen Raum eine gegenseitige Weghebung von Elektronen- und Positronenzuständen stattfindet). Dies kann man explizit für das Uehling-Potential zeigen. Für das Uehling-Potential (siehe 5.2.3-5.2.4) gilt:

$$V_{UE}(q) = -\frac{Ze^2}{q^2} F_{UE}(q)\ ,\ F_{UE}(0) = 0$$

Nach der Poisson-Gleichung (3.3.6b) ist:

$$-Ze F_{UE}(q) = \int d\vec{r}\ e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\ \rho_{UE}(\vec{r})$$

$\rho_{UE}(r)$ ist in Abb. 6.5 dargestellt. Hieraus folgt:

$$-Ze F_{UE}(0) = 0 = \int d\vec{r}\ \rho_{UE}(\vec{r})\ .$$

Außerdem bestätigen die numerischen Rechnungen (siehe Tabelle 6.2) die Relation (4.1.43). Hier muß man beachten, daß wir den Fall $Z \gg Z_c$ (Z_c ist die kritische Ladungszahl, bei der das 1S-Niveau des Elektrons das negative Kontinuum erreicht) außer acht lassen. Für den Fall $Z \geqslant Z_c$ siehe z.B. Rafelski et al[12].

Die Relation (4.1.43) steht im Zusammenhang mit unserer Interpretation von Teilchen, Antiteilchen und Vakuum. D.h. die Gleichung (4.1.43) gilt nicht, wenn man von vornherein mit einem geladenen Vakuum arbeitet.

Zum Schluß möchte ich mittels Spektral-Darstellung der S_F zeigen, wie die Singularitäten von S_F bzw. G entlang des Integrationsweges $(-\infty, +\infty)$ in (4.1.33) zu behandeln sind. Durch Einsetzen von(4.1.20) in (4.1.24) und durch die Verwendung der Antikommutatorenrelationen erhält man

$$S_F(x',x) = -i\,\theta(\tau) \sum_{E_{n_1}} e^{-iE_{n_1}\cdot\tau}\ \Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x}')\,\bar{\Phi}^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})$$

$$+i\,\theta(-\tau) \sum_{E_{n_2}} e^{-iE_{n_2}\cdot\tau}\ \Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x}')\,\bar{\Phi}^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\ e^{-i\omega\tau}\left\{\sum_{E_{n_1}} \frac{\Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x}')\,\bar{\Phi}^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x})}{\omega - E_{n_1} + i\varepsilon} + \sum_{E_{n_2}} \frac{\Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x}')\,\bar{\Phi}^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})}{\omega - E_{n_2} - i\varepsilon}\right\}. \qquad (4.1.44)$$

Dabei ist $\tau = x'_0 - x_0$ und ich habe für die θ -Funktion die Relation

$$\theta(\tau) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\varepsilon}$$

verwendet. Die Singularitäten liegen dann, wie in Abb. 4.1 angedeutet, unterhalb und oberhalb der reellen Achse.

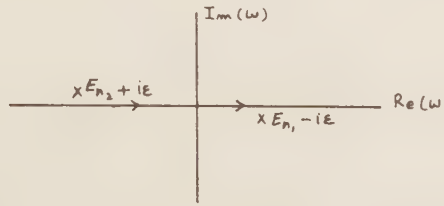


Abb. 4.1 Singularitäten in $S_F(x', x)$

Dieser Integrationsweg kann durch den Weg C in Abb. 4.2 ersetzt werden (durch Verschiebung des Integrationsweges in Abb. 4.1). Damit ist:

$$S_F(\vec{x}, \vec{x}', \tau)\gamma^0 = \frac{1}{2\pi} \int_C d\omega \, e^{-i\omega\tau} \left\{ \sum_{E_{n_1}} \frac{\Phi^{(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x}) \, \Phi^{\dagger(+)}_{E_{n_1}}(\vec{x}')}{\omega - E_{n_1}} + \sum_{E_{n_2}} \frac{\Phi^{(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x}') \, \Phi^{\dagger(-)}_{E_{n_2}}(\vec{x})}{\omega - E_{n_2}} \right\}$$

$$\equiv \frac{-1}{2\pi} \int_C d\omega \, e^{-i\omega\tau} \sum_{E_n} \frac{\Phi_{E_n}(\vec{x}') \, \Phi^{\dagger}_{E_n}(\vec{x})}{E_n - \omega} \,, \qquad (4.1.45)$$

wobei $\sum_{E_n}$ die Summe bzw. das Integral über das Spektrum E_n ist. Da $S_F = S^c$ ist, folgt aus dem Vergleich (4.1.45) und (4.1.13):

$$G(\vec{x}', \vec{x}, \omega) = \sum_{E_n} \frac{\Phi_{E_n}(\vec{x}') \, \Phi^{\dagger}_{E_n}(\vec{x})}{E_n - \omega} \qquad (4.1.46)$$

und damit ist

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = \frac{|e|}{2\pi i} \int_C d\omega \; sp(G(\vec{x}, \vec{x}, \omega)) = \frac{|e|}{2\pi i} \int_C d\omega \sum_{E_n} \frac{|\Phi_{E_n}(\vec{x})|^2}{E_n - \omega} \,. \qquad (4.1.47)$$

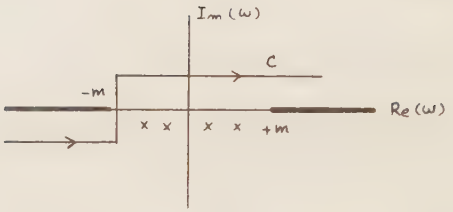


Abb. 4.2 Der Integrationsweg C

Es ist aus (4.1.45) ersichtlich, daß S bzw.G wegen der positiven Kontinuum-Energieeigenwerte des Elektrons einen Schnitt bei +m und wegen der negativen Kontinuum-Energieeigenwerte des Positrons einen Schnitt bei -m hat. Außerdem besitzt G wegen der Bindungsenergien des Elektrons Pole zwischen -m und +m.

Durch die Deformation des Integrationsweges C auf die imaginäre Achse (siehe Abb. 4.3) und Anwendung des Residuensatzes bezüglich der Pole, die zwischen Null und -m liegen, erhält man

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = |e| \left\{ \sum_{-m<E_n<0} \left| \Phi_{E_n}(\vec{x}) \right|^2 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \; sp\left(G(\vec{x},\vec{x},iy)\right) \right\}. \tag{4.1.48}$$

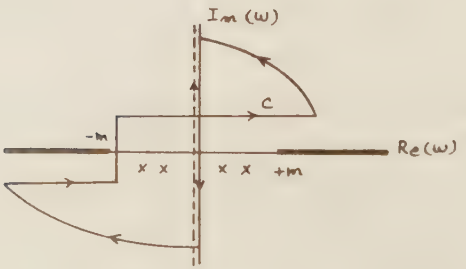


Abb. 4.3 Deformation des Integrationsweges C

4.2 Die Partialwellendarstellung von G bzw. ρ_{vp}

Die radialen Greensfunktionen $G_\kappa(|\vec{x}|,|\vec{x}'|,\omega)$ lassen sich leicht durch die Lösungen der Dirac-Gleichung (siehe Teil 3.3) darstellen. Deshalb werde ich die Partialwellenzerlegung für G bzw. ρ_{vp} durchführen. Für ein kugelsymmetrisches Potential hat die Greensfunktion G eine Partialwellenzerlegung der Form[18]

$$G(\vec{x}',\vec{x},\omega) = \sum_{\kappa,\mu} \begin{pmatrix} \chi^\mu_\kappa(\hat{x}') & 0 \\ 0 & i\chi^\mu_{-\kappa}(\hat{x}') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{11}_\kappa(r',r,\omega) & G^{12}_\kappa(r',r,\omega) \\ G^{21}_\kappa(r',r,\omega) & G^{22}_\kappa(r',r,\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{\dagger\mu}_\kappa(\hat{x}) & 0 \\ 0 & -i\chi^{\dagger\mu}_{-\kappa}(\hat{x}) \end{pmatrix}, \tag{4.2.1}$$

wobei $r = |\vec{x}|$, $r' = |\vec{x}'|$, $\kappa = \pm(j+\frac{1}{2})$ für einen gegebenen Gesamtdrehimpuls j ist und $\chi^\mu_\kappa(\hat{x}) = \sum \langle \ell_{\kappa,\mu-m}, \tfrac{1}{2} m | j\mu\rangle Y_{\ell_{\kappa,\mu-m}}(\hat{x}) | \tfrac{1}{2} m\rangle$ ist. $G_\kappa(r',r,\omega)$ erfüllt die Gleichung

$$\begin{pmatrix} m + V_c(r') - \omega & -\frac{d}{dr'} + \frac{\kappa-1}{r'} \\ \frac{d}{dr'} + \frac{\kappa+1}{r'} & -m + V_c(r') - \omega \end{pmatrix} G_\kappa(r',r,\omega) = \frac{\delta(r'-r)}{r'r} . \tag{4.2.2}$$

$V_c(r')$ ist in (3.3.10) bzw. (3.3.14) definiert.
Wegen der Relationen

$$\sum_\mu \chi^\mu_\kappa(\hat{x})\, \chi^{\dagger\mu}_\kappa(\hat{x}) = \frac{|\kappa|}{4\pi}\, \mathbb{1} \tag{4.2.3a}$$

$$\sum_\mu \chi^\mu_{+\kappa}(\hat{x})\, \chi^{\dagger\mu}_{-\kappa}(\hat{x}) = -\frac{|\kappa|}{4\pi}\, \vec{\sigma}\cdot\hat{x}\, \mathbb{1} \tag{4.2.3b}$$

folgt

$$Sp(G(\vec{x}',\vec{x},\omega)) = \sum_{\kappa=\pm1}^{\pm\infty} \frac{|\kappa|}{2\pi}\, Sp(G_\kappa(r',r,\omega)) \tag{4.2.4}$$

und analog dazu erhält man

$$|\Phi_{E_n}(\vec{x})|^2 = \sum_{\kappa=\pm1}^{\pm\infty} \frac{|\kappa|}{2\pi}\, |\Psi_{\kappa,E_n}(r)|^2 , \tag{4.2.5a}$$

wobei $\Psi_{\kappa,E_n}(r)$ die radiale Dirac Gleichung:

$$\begin{pmatrix} m + V_c(r) - E_n & -\frac{d}{dr} + \frac{\kappa-1}{r} \\ \frac{d}{dr} + \frac{\kappa+1}{r} & -m + V_c(r) - E_n \end{pmatrix} \Psi_{\kappa,E_n}(r) = 0 \tag{4.2.5b}$$

erfüllt.

Durch Einsetzen von (4.2.5a) und (4.2.4) in (4.1.48) folgt:

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = \sum_{\kappa=\pm1}^{\pm\infty} \rho_\kappa(r) = \sum_{\kappa=1}^{\infty} [\rho_\kappa(r) + \rho_{-\kappa}(r)] \equiv \sum_{\kappa=1}^{\infty} \rho_{|\kappa|}(r) \quad (4.2.6)$$

$$\rho_\kappa(r) = \frac{|e|\cdot|\kappa|}{2\pi} \left\{ \sum_{-m<E_n<0} \left|\Psi_{\kappa,E_n}(r)\right|^2 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, Sp\left(G_\kappa(r,r,iy)\right) \right\}. \quad (4.2.7)$$

Wegen Gleichung (4.2.2) folgt

$$G_{-\kappa}(r,r,\omega) \equiv G_{-\kappa}(V_c,r,r,\omega) = -\beta^{(1)} G_\kappa(-V_c,r,r,-\omega)\beta^{(1)} . \quad (4.2.8a)$$

$\beta^{(1)}$ ist in Anhang A definiert. Da hier das Potential $V_c(r)$ proportional zu $Z\alpha$ ist, schreibt man für (4.2.8a):

$$G_{-\kappa}(V_c,r,r,\omega) \equiv G_{-\kappa}(Z\alpha,r,r,\omega) = -\beta^{(1)} G_\kappa(-Z\alpha,r,r,-\omega)\beta^{(1)} . \quad (4.2.8b)$$

Mit Hilfe von (4.2.8a), (4.2.8b) und (4.2.6-7) ergibt sich:

$$\rho_{|\kappa|}(r) = \frac{|e|\cdot|\kappa|}{2\pi} \left\{ \sum_{-m<E_n<0} \left[\left|\Psi_{\kappa,E_n}(r)\right|^2 + \left|\Psi_{-\kappa,E_n}(r)\right|^2 \right] \right.$$

$$\left. + \frac{Re}{\pi} \int_0^\infty dy \left[Sp\left(G_\kappa(Z\alpha,r,r,iy)\right) - Sp\left(G_\kappa(-Z\alpha,r,r,iy)\right) \right] \right\}. \quad (4.2.9)$$

Interessant ist auch die Darstellung von $\rho_{|\kappa|}(r)$, womit man die Ladungsdichte bis zu einer bestimmten Ordnung in $(Z\alpha)^n$ $n=0,1,2\ldots$ angeben kann. Deshalb entwickelt man[18] G_κ nach Potenzen von $(Z\alpha)$ bzw. $V_0(r)$ $(V_c(r) = -Z\alpha V_0(r))$

$$G_\kappa = G_\kappa^0 + (Z\alpha) G_\kappa^0 V_0 G_\kappa^0 + \ldots\ldots = \sum_{n=0}^{\infty} (Z\alpha)^n G_\kappa^0 (V_0 G_\kappa^0)^n$$

$$\equiv \sum_{n=0} (Z\alpha)^n G_\kappa^n , \quad (4.2.10)$$

wobei G_κ^0 die Resolvente in Abwesenheit des äußeren Potentials ist. Für ein gegebenes κ ist:

$$Sp\left[G_\kappa^n(r,r,\omega)\right] = \int_0^\infty \prod_{i=1}^{n} \left(dr_i\, r_i^2\, V_0(r_i)\right) \cdot Sp\left[G_\kappa^0(r,r_1)\ldots G_\kappa^0(r_n,r)\right] . \quad (4.2.11)$$

Nun kann man mit Hilfe von (4.1.47), (4.2.4), (4.2.6) und (4.2.10) schreiben

$$\rho_{vp}(\vec{x}) = \sum_{\kappa=1}^{\infty} \rho_{|\kappa|}(r) = \frac{|e|}{i(2\pi)^2} \int_c d\omega \sum_{\kappa=1}^{\infty} |\kappa| \sum_n (Z\alpha)^n \left[Sp\left(G_\kappa^n(r,r,\omega)\right) \right.$$

$$\left. -(-)^n Sp\left(G_\kappa^n(r,r,-\omega)\right) \right] \equiv \sum \sum \rho_{|\kappa|}^n(r) . \quad (4.2.12)$$

Dabei wurde die Relation

$$Sp\left[G^n_{-\varkappa}(r,r,\omega)\right] = -(-)^n Sp\left[G^n_{\varkappa}(r,r,-\omega)\right], \tag{4.2.13}$$

die aus (4.2.8a) folgt, verwendet. Da $G^0_\varkappa$ bzw. $G^n_\varkappa$ keinen Pol zwischen -m und +m haben, ergibt sich nach Deformation des Integrationswegs c zur imaginären Achse (siehe Abb. 4.3)

$$\rho^n_{|\varkappa|}(r) = \begin{cases} \frac{|e|\cdot|\varkappa|}{(2\pi)^2}\cdot 2\,(Z\alpha)^n \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, G^n_\varkappa(r,r,iy) & \text{für ungerade } n \\ 0 & \text{für gerade } n \end{cases} \tag{4.2.14}$$

D.h. $\rho^n_{|\varkappa|}(r)$ und damit $\rho^{(n)}(r) = \sum_\varkappa \rho^n_{|\varkappa|}(r)$ erfüllt wie $V^{(n)}_{VP}$ die Forderung des Furry-Theorems. Mit $\rho^n_{|\varkappa|}(r)$ kann man nun $V^{(n)}_{VP}$ für jede beliebige Ordnung in $(Z\alpha)^n$ errechnen.
Man kann Gleichung (4.2.12) in der Form

$$\rho_{VP}(\vec{x}) = \sum_{\varkappa=1}^{\infty}\sum_n \rho^n_{|\varkappa|}(r) = \sum_{k=1}^{\infty}\left(\rho^1_{|\varkappa|}(r)+\rho^3_{|\varkappa|}(r)+\cdots\right) \equiv \rho^{(1)}(r)+\rho^{(3)}(r)+\cdots$$

schreiben und nach der Konvergenz der Summe $\sum_\varkappa \rho^i_{|\varkappa|}(r)$ für jedes i=1,3,5,... fragen. Dabei stellte man fest[15,18], daß $\varkappa=1$ bereits 93% von $\rho^{(3)}$ und 99% von $\rho^{+5} = \rho^{(5)}+\rho^{(7)}+\cdots$ liefert. Man kann also ρ_{VP} durch folgende Näherung ersetzen:

$$\rho_{VP}(\vec{x}) \approx \rho^{(1)}(r) + \rho^3_{|\varkappa|}(r) + \rho^5_{|\varkappa|}(r) + \cdots \equiv \rho^{(1)}(r) + \rho^{+3}_{|\varkappa|}(r), \tag{4.2.16}$$

$$\rho^{+3}_{|\varkappa|}(r) = \rho^3_{|\varkappa|}(r) + \rho^5_{|\varkappa|}(r) + \cdots = \rho_{|\varkappa|} - \rho^1_{|\varkappa|}(r)$$

$$= \frac{|e|}{2\pi}\left\{\sum_{-m<E_n<0}\left[|\psi_{n,\varkappa}(r)|^2 + |\psi_{-n,\varkappa}|^2\right]\right.$$

$$+\frac{Re}{i}\int_0^\infty dy\left[Sp\left(G_1(Z\alpha,r,r,iy)\right) - Sp\left(G_1(-Z\alpha,r,r,iy)\right)\right.$$

$$\left.\left. -2\,Z\alpha\, Sp\left(G^1_1(r,r,iy)\right)\right]\right\} \tag{4.2.17}$$

Wie bereits erwähnt, enthält V_{VP} im Impulsraum die divergenten Teile . Entsprechend erwartet man im Ortsraum, daß $V_{VP}^{(1)}$ und $V_{VP}^{(3)}$ bzw. $\rho^{(1)}$ und $\rho^{(3)}$ nicht eindeutig definiert sind (abgesehen von den Termen $V_{VP}^{(n)}$ bzw. $\rho^{(n)}$, n=0,2,4,...., welche wegen des Furry-Theorems Null sind).
Gyulassy[18] hat dies im Fall V=const. mittels der Gleichung (4.1.32) gezeigt (man erhält für $\rho^{(1)}$ oder $\rho^{(3)}$ zwei verschiedene Ergebnisse, je nachdem, in welcher Reihenfolge man in (4.1.32) die Integration und den Limes durchführt). Er hat außerdem nachgewiesen, daß $\rho^{3}_{1x1}(r)$ keine Mehrdeutigkeit zeigt und eichinvariant ist, obwohl $\rho^{(3)}(\vec{x})$ nicht eindeutig definiert ist. Dagegen weist $\rho^{1}_{1x1}(r)$ wie $\rho^{(1)}(\vec{x})$ Mehrdeutigkeit auf, und deshalb müssen beide regularisiert werden.
Da im Ausdruck für $\rho^{+3}_{111}(r)$ (siehe 4.2.17) dieser Term ($\rho^{1}_{111}(r)$) bzw. die radiale Greensfunktion G_1^1 abgezogen wird, erwartet man, daß $\rho^{+3}_{111}(r)$ eindeutig definiert ist und man keine Regularisierung braucht. Dies wurde numerisch bestätigt (siehe Teil 6). Aus (4.1.16b) und (4.2.16-17) folgt:

$$V_{VP}(\vec{P},\vec{P}) = \frac{-|e|}{|\vec{q}|^2}\int d\vec{x}\; e^{-i\vec{x}\cdot\vec{q}}\;\rho_{VP}(\vec{x}) \approx \frac{-|e|}{|\vec{q}|^2}\int d\vec{x}\; e^{-i\vec{x}\cdot\vec{q}}\;\rho^{(1)}(\vec{x})$$

$$+\frac{-|e|}{|\vec{q}|^2}\int d\vec{x}\; e^{-i\vec{x}\cdot\vec{q}}\;\rho^{+3}_{111}(|\vec{x}|)\quad,\ \vec{q}=\vec{P}'-\vec{P}$$

$$\equiv V_{UE}(\vec{P},\vec{P}) + V_{VP}^{+3}(\vec{P},\vec{P}), \qquad (4.2.18)$$

wobei $V_{UE}(\vec{P},\vec{P}) =$ das Uehling-Potential ist (siehe 5.2.3) und

$$V_{VP}^{+3}(\vec{P},\vec{P}) = \frac{-|e|}{|\vec{q}|^2}\,4\pi\int_0^\infty dr\; r^2\; j_0(|\vec{q}|\cdot r)\;\rho^{+3}_{111}(r)$$

$$\equiv \frac{-|e|}{|\vec{q}|^2}\,F^{+3}(|\vec{q}|,2\alpha) \qquad (4.2.19)$$

ist, mit

$$F^{+3}(|\vec{q}|,z\alpha) = 4\pi \Big\{ \int_0^R dr\, r^2 \frac{\sin(|\vec{q}|\cdot r)}{|\vec{q}|\cdot r} \frac{|e|}{2\pi} \Big[\sum_{-m<E_n<0} \Big(|\Psi^{<}_{1,E_n}(r)|^2 + |\Psi^{<}_{-1,E_n}(r)|^2 \Big) + \frac{Re}{\pi} I^{<}(r,z\alpha) \Big]$$

$$+ \int_R^\infty dr\, r^2 \frac{\sin(|\vec{q}|\cdot r)}{|\vec{q}|\cdot r} \frac{|e|}{2\pi} \Big[\sum_{-m<E_n<0} \Big(|\Psi^{>}_{1,E_n}(r)|^2 + |\Psi^{>}_{-1,E_n}(r)|^2 \Big) + \frac{Re}{\pi} I^{>}(r,z\alpha) \Big] \Big\}, \qquad (4.2.20)$$

$$I^{<}(r,z\alpha) \underline{\underline{r\le R}} \int_0^\infty dy \Big[Sp\big(G_1^{<}(z\alpha,r,r,iy)\big) - Sp\big(G_1^{<}(-z\alpha,r,r,iy)\big) - 2z\alpha\, Sp\big(G_1^{1<}(r,r,iy)\big) \Big], \qquad (4.2.21a)$$

$$I^{>}(r,z\alpha) \underline{\underline{r\ge R}} \int_0^\infty dy \Big[Sp\big(G_1^{>}(z\alpha,r,r,iy)\big) - Sp\big(G_1^{>}(-z\alpha,r,r,iy)\big) - 2z\alpha\, Sp\big(G_1^{1>}(r,r,iy)\big) \Big], \qquad (4.2.21b)$$

$$\Psi_{\kappa,E_n}(r) = \begin{cases} \Psi^{<}_{\kappa,E_n}(r) & r \le R \\ \Psi^{>}_{\kappa,E_n}(r) & r \ge R \end{cases}. \qquad (4.2.22)$$

Die Ausdrücke für $Sp(G_1^{><})$ und $Sp(G_1^{1><})$ sind in den nächsten Abschnitten angegeben.

4.3 Konstruktion von $Sp(G^{>}_{\kappa=\pm 1})$ und $Sp(G^{<}_{\kappa=\pm 1})$

In Anhang D erläutere ich, wie man die radiale Greensfunktion $\tilde{G}^{\circ}_{\kappa}(r',r,\tilde{\omega})$ bzw. $G^{\epsilon}_{\kappa}(r',r,\omega)$ für die Dirac-Gleichung mit Potential $V(r)=-\frac{\gamma}{R}$ bzw. $V(r)=-\frac{\gamma}{r}$ erhält. Analog läßt sich auch die Greensfunktion für den Fall

$$V_c(r) = -\gamma V_0(r) = -\gamma \begin{cases} \frac{1}{R} & r \geq R \\ \frac{1}{r} & r \leq R \end{cases}, \quad \gamma = z\alpha \tag{4.3.1}$$

konstruieren. Die Lösungen der Dirac-Gleichung für $V(r)=\frac{\gamma}{R}$ ($\tilde{u}_\kappa$ und $\tilde{v}_\kappa$) bzw. $V(r)=-\frac{\gamma}{r}$ (M_κ und W_κ) sind in Anhang C.2 und C.1 zu finden. Mit ihrer Hilfe erhält man die im Ursprung reguläre Lösung[18]:

$$\Psi_{R,\kappa}(r,\omega) = \theta(R-r)\,\tilde{u}_\kappa(r,\tilde{\omega}) + \theta(r-R)[a_\kappa M_\kappa(r,\omega) + b_\kappa W_\kappa(r,\omega)] \tag{4.3.2a}$$

und die im Unendlichen reguläre Lösung

$$\Psi_{I,\kappa}(r,\omega) = \theta(R-r)[\tilde{a}_\kappa \tilde{u}_\kappa(r,\tilde{\omega}) + \tilde{b}_\kappa \tilde{v}_\kappa(r,\tilde{\omega})] + \theta(r-R) W_\kappa(r,\omega) \tag{4.3.2b}$$

Aus den Kontinuitätsgleichungen

$$\Psi_{R,\kappa}(R-0,\omega) = \Psi_{R,\kappa}(R+0,\omega) \tag{4.3.3}$$

$$\Psi_{I,\kappa}(R-0,\omega) = \Psi_{I,\kappa}(R+0,\omega) \tag{4.3.4}$$

ergibt sich

$$a_\kappa \equiv [\tilde{u},W]_R / [M,W]_R \;, \quad b_\kappa \equiv [M,\tilde{u}]_R / [M,W]_R \;, \tag{4.3.5}$$

$$\tilde{a}_\kappa \equiv [W,\tilde{v}]_R / [\tilde{u},\tilde{v}]_R \;, \quad \tilde{b}_\kappa \equiv [\tilde{u},W]_R / [\tilde{u},\tilde{v}]_R \;, \tag{4.3.6}$$

wobei z.B. $[\tilde{u},W]_R = R^2[\tilde{u}^{(1)}_\kappa(R,\tilde{\omega})\,W^{(1)}_\kappa(R,\omega) - W^{(2)}_\kappa(R,\omega)\,\tilde{u}^{(1)}_\kappa(R,\tilde{\omega})]$ ist. Außerdem wird in Anhang D.1 und D.2 gezeigt, daß

$$[\tilde{u},\tilde{v}]_R = 1,$$

$$[M,W]_R = 4(m^2-\omega^2)(m+\omega)\,\frac{\Gamma(2s+1)}{\Gamma(s-\nu)}, \quad s=\sqrt{\kappa^2-(z\alpha)^2} \;, \quad \nu = \frac{z\alpha\omega}{\sqrt{m^2-\omega^2}}$$

ist. Aus (4.3.2a-2b) und (D.2a) erhält man für die Wronski-Determinante:

$$J_\varkappa(\omega) = \tilde{b}_\varkappa\,[\tilde{u},\tilde{v}]_R = [\tilde{u},w]_R\,. \tag{4.3.7}$$

Damit ergibt sich für r, $\acute{r} \leqslant R$

$$G_\varkappa^<(z\alpha,\acute{r},r,i\gamma) \equiv \tilde{G}_\varkappa^0(\acute{r},r,\tilde{\omega}) + \frac{\tilde{a}_\varkappa}{J_\varkappa(i\gamma)}\;\tilde{u}_\varkappa(\acute{r},\tilde{\omega})\,\tilde{u}_\varkappa^T(r,\tilde{\omega}) \tag{4.3.8}$$

und für r, $\acute{r} \geqslant R$

$$G_\varkappa^>(z\alpha,\acute{r},r,i\gamma) \equiv G_\varkappa^c(\acute{r},r,i\gamma) + \frac{b_\varkappa}{J_\varkappa(i\gamma)}\;W_\varkappa(\acute{r},i\gamma)\,W_\varkappa^T(r,i\gamma), \tag{4.3.9}$$

wobei $\tilde{\omega} = i\gamma + \frac{z\alpha}{R}$ ist (T steht für transponieren).
Für r=$\acute{r}$ gilt:

$$sp\left(G_\varkappa(z\alpha,r,r,i\gamma)\right) = \begin{cases} sp\left(G_\varkappa^<(z\alpha,r,r,i\gamma)\right) & r\leqslant R \\ sp\left(G_\varkappa^>(z\alpha,r,r,i\gamma)\right) & r\geqslant R \end{cases}$$

$$= \begin{cases} sp\left(\tilde{G}_\varkappa^0(r,r,\tilde{\omega})\right) + \frac{\tilde{a}_\varkappa}{J_\varkappa(i\gamma)}\;(\tilde{u}\tilde{u})_r & r\leqslant R \\ sp\left(G_\varkappa^c(r,r,i\gamma)\right) + \frac{b_\varkappa}{J_\varkappa(i\gamma)}\;(ww)_r\,, & r\geqslant R \end{cases} \tag{4.3.10}$$

$$(\tilde{u}\tilde{u})_r \equiv \tilde{u}_\varkappa^T(r,\tilde{\omega})\,\tilde{u}_\varkappa(r,\tilde{\omega}), \tag{4.3.11}$$

$$(ww)_r \equiv W_\varkappa^T(r,i\gamma)\,W_\varkappa(r,i\gamma)\,. \tag{4.3.12}$$

Unter Verwendung der Relationen zwischen den Whittaker-Funktionen $M_{k,\mu}(x)$ bzw. $W_{k,\mu}(x)$ und $\varphi_1(a,c,x)$ bzw. $\psi_1(a,c,x)$ (siehe Anhang E) kann ich die Ausdrücke für $G_\varkappa^c$, $(ww)_r$, $1_\varkappa(i\gamma)$, ··· berechnen. Danach setze ich die berechneten Ausdrücke in (4.3.10) ein und es ergibt dann für $\varkappa = 1$:

$$sp\left(G_{\varkappa=1}^<(z\alpha,r,r,i\gamma)\right) = \frac{1}{2\tilde{\lambda}r}\left[A_1(z\alpha,r,\tilde{\omega}) + e^{-2\tilde{\lambda}(R-r)}\;\frac{A_2(z\alpha,R,i\gamma)}{A_3(z\alpha,R,i\gamma)}\;A_4(z\alpha,r,\tilde{\omega})\right], \tag{4.3.13}$$

$$sp\left(G_{\varkappa=1}^>(z\alpha,r,r,i\gamma)\right) = \frac{(2\lambda r)^c}{r^3\cdot 4\lambda^2\cdot(m+i\gamma)\,\Gamma(a)\,\Gamma(c-a)}\left[B_1(z\alpha,r,i\gamma)\right.$$

$$\left. + e^{-2\lambda(r-R)}\;\frac{B_2(z\alpha,R,i\gamma)}{B_3(z\alpha,R,i\gamma)}\;B_4(z\alpha,r,i\gamma)\right], \tag{4.3.14}$$

$$\lambda = \sqrt{m^2+y^2} \quad , \quad \tilde{\lambda} = \sqrt{m^2-(iy+\frac{\gamma}{R})^2} \quad , \quad a = 1-\nu+S \; , \; c = 2S+1 , \tag{4.3.15}$$

$$S = \sqrt{1-(z\alpha)^2} \quad , \quad \nu = \frac{iy\gamma}{\lambda} \quad , \quad \gamma = z\alpha , \tag{4.3.16}$$

$$A_1(z\alpha, r, \tilde{\omega}) = \tilde{\lambda}\left[(m+\tilde{\omega})(1+\frac{1}{\tilde{\lambda}r})(\frac{1}{\tilde{\lambda}r}-1-e^{-2\tilde{\lambda}r}(1+\frac{1}{\tilde{\lambda}r}))-(\tilde{\omega}-m)\right. \tag{4.3.17}$$
$$\left.(1-e^{-2\tilde{\lambda}r})\right],$$

$$A_2(z\alpha, R, iy) = \left\{-P_1(R)\left[\lambda\tilde{\lambda}(1+\frac{1}{\tilde{\lambda}R})-(m+iy)(\tilde{\omega}-m)\right]\right.$$
$$\left.+P_2(R)\left[\lambda\tilde{\lambda}(1+\frac{1}{\tilde{\lambda}R})+(m+iy)(\tilde{\omega}-m)\right]\right\}, \tag{4.3.18}$$

$$A_3(z\alpha, R, iy) = P_1(R)\, A_{31}(R) + P_2(R)\, A_{32}(R) , \tag{4.3.19}$$

$$A_4(z\alpha, r, \tilde{\omega}) = \left\{(m+\tilde{\omega})^2\left[(\frac{1}{\tilde{\lambda}r}-1)-e^{-2\tilde{\lambda}r}(1+\frac{1}{\tilde{\lambda}r})\right]^2+(\tilde{\lambda})^2(1-e^{-2\tilde{\lambda}r})^2\right\}, \tag{4.3.20}$$

$$P_1(R) = (1+\frac{\gamma m}{\lambda})\,\Psi_1(a, c, 2\lambda R), \tag{4.3.21}$$

$$P_2(R) = (a-1)\,\Psi_1(a-1, c, 2\lambda R), \tag{4.3.22}$$

$$A_{31}(R) = \tilde{\lambda}(m+iy)(1-e^{-2\tilde{\lambda}R})+\lambda(\tilde{\omega}+m)(\frac{1}{\tilde{\lambda}R}-1-e^{-2\tilde{\lambda}R}(1+\frac{1}{\tilde{\lambda}R})), \tag{4.3.23}$$

$$A_{32}(R) = \tilde{\lambda}(m+iy)(1-e^{-2\tilde{\lambda}R})-\lambda(\tilde{\omega}+m)(\frac{1}{\tilde{\lambda}R}-1-e^{-2\tilde{\lambda}R}(1+\frac{1}{\tilde{\lambda}R})), \tag{4.3.24}$$

$$B_1(z\alpha, r, \omega) = \left\{(m+iy)^2\left[P_1(r)+P_2(r)\right]\left[F_1(r)-F_2(r)\right]\right.$$
$$\left.+\lambda^2\left[P_1(r)-P_2(r)\right]\left[F_1(r)-F_2(r)\right]\right\}, \tag{4.3.25}$$

$$B_2(z\alpha, R, \omega) = -F_1(R)\, A_{31}(R) + F_2(R)\, A_{32}(R) , \tag{4.3.26}$$

$$B_3(z\alpha, R, \omega) = A_3(z\alpha, R, \omega), \tag{4.3.27}$$

$$B_4(z\alpha,r,\omega) = \left\{ (m+iy)^2 \left[P_1(r) + P_2(r) \right]^2 + \lambda^2 \left[P_1(r) - P_2(r) \right]^2 \right\}, \qquad (4.3.28)$$

$$F_1(r) = \varphi_1(a,c,2\lambda r) , \qquad (4.3.29)$$

$$F_2(r) = \left(1 - \frac{\gamma m}{\lambda}\right) \frac{1}{c-a} \varphi_1(a-1,c,2\lambda r) , \qquad (4.3.30)$$

Man erhält $sp\left(G_{x=1}(-z\alpha,r,r,iy)\right)$ aus $sp\left(G_{x=1}(z\alpha,r,r,iy)\right)$ durch die Substitution $Z \to -Z$ und damit $\gamma \to -\gamma$, $\nu \to -\nu$.
Mittels dieser Ausdrücke ergibt sich das folgende asymptotische Verhalten

1. bei festem y

$$sp\left(G_1^>(z\alpha,r,r,iy)\right) - sp\left(G_1^>(-z\alpha,r,r,iy)\right) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{2\gamma m^2}{r^3\lambda^3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^4}\right) \qquad (4.3.31)$$

$$r^2\left[sp\left(G_1^<(z\alpha,r,r,iy)\right) - sp\left(G_1^<(-z\alpha,r,r,iy)\right)\right] \xrightarrow{r\to 0} \frac{16\gamma}{3R} + \mathcal{O}(r^2) \qquad (4.3.32)$$

2. bei festem r

$$sp\left(G_1^>(z\alpha,r,r,iy)\right) - sp\left(G_1^>(-z\alpha,r,r,iy)\right) \xrightarrow{y\to\infty} \frac{2\gamma}{y^3 r^3}\left[\frac{1}{r^2} + m^2 - \frac{3im}{2yr^2}\right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{y^5}\right) \qquad (4.3.33)$$

$$sp\left(G_1^<(z\alpha,r,r,iy)\right) - sp\left(G_1^<(-z\alpha,r,r,iy)\right) \xrightarrow{y\to\infty} \frac{2\gamma}{y^3 R r^2}\left[\frac{1}{r^2} + m^2 - \frac{3im}{2yr^2}\right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{y^5}\right) \qquad (4.3.34)$$

Aus diesen Relationen und dem asymptotischen Verhalten von $sp(G_1^<)$, das im nächsten Abschnitt angegeben wird, läßt sich das Konvergenzverhalten des Integranden in (4.2.21a-b) bzw. (4.2.22) bezüglich der y - und der r -Integration bestimmen. Außerdem sind diese Beziehungen hilfreich bei der numerischen Berechnung von $\overset{+3}{P}(r)$ und $\overset{+3}{F}(i\eta,z\alpha)$ (siehe 4.2.19-20).

4.4 Konstruktion von $SP(G_{x=1}^{1><})$

$SP(G_1^1)$ ist gegeben durch (siehe 4.2.11):

$$SP(G_1^1(r,r;ig)) = \int_0^\infty dx\, x^2\, V_0(x)\; SP\left[G_1^0(r,x;ig)\, G_1^0(x,r;ig)\right], \quad (4.4.1)$$

für die freie radiale Greensfunktion G_1^0 gilt (siehe Anhang D.1):

$$G_1^0(r,x;ig) = \theta(x-r)\, u_{x=1}(r;ig)\, v_{x=1}^T(x;ig) + \theta(r-x)\, v_{x=1}(r;ig)\, u_{x=1}^T(x;ig) \quad (4.4.2)$$

Aus (4.4.1) und (4.4.2) erhält man:

$$SP(G_1^1(r,r;ig)) = (uu)_r \int_r^\infty dx\, x^2\, V_0(x)\, (vv)_x + (vv)_r \int_0^r dx\, x^2\, V_0(x)\, (uu)_x,$$

$$(vv)_r = v_{x=1}^T(r;ig)\, v_{x=1}(r;ig), \quad (4.4.3)$$

$$(uu)_r = u_{x=1}^T(r;ig)\, u_{x=1}(r;ig), \quad (4.4.4)$$

Wenn ich für die Ladungsverteilung des Kerns Modell I wähle $\left(V_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{R} & x \leq R \\ \frac{1}{x} & x \geq R \end{cases}\right)$, folgt:

$$SP\left(G_1^1(r,r;ig)\right) = \begin{cases} SP\left(G_1^{1<}(r,r;ig)\right) & r \leq R \\ SP\left(G_1^{1>}(r,r;ig)\right) & r \geq R \end{cases}, \quad (4.4.5)$$

$$SP\left(G_1^{1<}(r,r;ig)\right) = (uu)_r \int_{r<R}^\infty dx\, x^2\, V_0(x)\, (vv)_x + (vv)_r \int_0^{r<R} dx\, x^2\, V_0(x)\, (uu)_x$$

$$\equiv (uu)_r \left[J_2^<(R;ig) - J_2^<(r;ig) - J_2^>(R;ig)\right] + (vv)_r\, J_1^<(r;ig) \quad (4.4.6)$$

$$SP\left(G_1^{1>}(r,r;ig)\right) = (uu)_r \int_{r>R}^\infty dx\, x^2\, V_0(x)\, (vv)_x + (vv)_r \int_0^{r>R} dx\, x^2\, V_0(x)\, (uu)_x$$

$$\equiv (uu)_r \left[-J_2^>(r;ig)\right] + (vv)_r \left[J_1^<(R;ig) + J_1^>(r;ig) - J_1^>(R;ig)\right] \quad (4.4.7)$$

Dabei wurden folgende Definitionen verwendet:

$$J_1^{<}(x,iy) \equiv \int dx\, x^2 \frac{1}{R}(uu)_x = \frac{-1}{\lambda R(m+iy)}\left[\frac{m}{2}\sinh(2\lambda x) + iy\cdot(\lambda x) - (m+iy)\frac{\sinh^2(\lambda x)}{\lambda x}\right] \quad (4.4.8)$$

$$J_1^{>}(x,iy) \equiv \int dx\, x^2 \frac{1}{x}(uu)_x = \frac{iy}{(m-iy)}\left[\mathrm{chi}(2\lambda x) - \gamma_E - \ln(2\lambda x)\right] - \frac{1}{2}\left(\frac{m+iy}{m-iy}\right)\left[\frac{\sinh(2\lambda x)}{\lambda x} - \left(\frac{\sinh(\lambda x)}{\lambda x}\right)^2\right] \quad (4.4.9)$$

$$J_2^{<}(x,iy) \equiv \int dx\, x^2 \frac{1}{R}(vv)_x = \frac{e^{-2\lambda x}}{\lambda R}\left[\frac{m}{m+iy} + \frac{1}{\lambda x}\right] \quad (4.4.10)$$

$$J_2^{>}(x,iy) \equiv \int dx\, x^2 \frac{1}{x}(vv)_x = \frac{e^{-2\lambda x}}{\lambda x}\left(1 + \frac{1}{2\lambda x}\right) - \frac{2iy}{m+iy}E_1(2\lambda x), \quad (4.4.11)$$

γ_E ist die Eulersche Konstante, chi(2λx) der Integralkosinushyperbolikus (siehe Anhang F) und E_1 das Exponetialintegral. Für das asymptotische Verhalten von $sp(G_1')$ erhalte ich:

1. für γ =const.

$$2\gamma\left[sp\left(G_1^{1>}(r,r,iy)\right)\right] \xrightarrow{r\to\infty} \frac{2\gamma m^2}{r^3\lambda^3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^4}\right) \quad (4.4.12)$$

$$2\gamma\left[sp\left(G_1^{1<}(r,r,iy)\right)\right] \xrightarrow{r\to 0} \frac{8\gamma r}{3R} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \quad (4.4.13)$$

2. für r =const.

$$2\gamma\left[sp\left(G_1^{1>}(r,r,iy)\right)\right] \xrightarrow{y\to\infty} \frac{2\gamma}{y^3r^3}\left[m^2 + \frac{1}{r^2} - \frac{3im}{2yr^2}\right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{y^5}\right) \quad (4.4.14)$$

$$2\gamma\left[sp\left(G_1^{1<}(r,r,iy)\right)\right] \xrightarrow{y\to\infty} \frac{2\gamma}{r^2 R\, y^3}\left[m^2 + \frac{1}{r^2} - \frac{3im}{2yr^2}\right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{y^5}\right) \quad (4.4.15)$$

Mit Hilfe des asymptotischen Verhaltens von $sp(G_1^{>})$, $sp(G_1^{<})$ (siehe 4.3.31-34), $sp(G_1^{1<})$ und $sp(G_1^{1>})$ (siehe 4.4.12-15) kann ich die Konvergenz der Integrale $I^{<}(r,2d)$ und $I^{>}(r,2d)$ (definiert in (4.2.21a-b)) grob abschätzen:

ihre Integranden fallen für $\vartheta \to \infty$ mindestens wie $\frac{1}{\vartheta^5}$ ab. Außerdem bin ich nun sicher, daß das Integral über ν (4.2.20) und damit $\vec{F}(\vec{n},\mu)$ existiert.

5. Numerik

In diesem Kapitel erläutere ich nun, wie man die Bindungsenergien und die dazugehörigen Energieverschiebungen aufgrund der Strahlungskorrekturen im Ortsraum berechnet. Dann zeige ich ausführlich, wie ich diese im Impulsraum bestimmt habe. Dabei diskutiere ich die numerischen Verfahren und die Einzelheiten, wie Konvergenz, Genauigkeit, usw.

5.1 Bestimmung der Bindungsenergien und der Energieverschiebungen

Alle Resultate, die von Greiner[5] und anderen Autoren bezüglich der Bindungsenergien des Elektrons ($E=m-e_b$), der Vakuum-Polarisationskorrekturen und der Selbstenergie-Korrekturen vorliegen, sind im Ortsraum gerechnet worden. Im folgenden möchte ich kurz erläutern, wie sie diese Effekte numerisch bestimmt haben, und anschließend werde ich unsere Methode vorstellen.

Sei $$V(r) = \begin{cases} V_1(r) & r \leq R \\ V_2(r) & r \geq R \end{cases}$$

die potentielle Energie des Elektrons im äußeren Feld. Der Bindungszustand wird wie folgt gewonnen: aus der Lösung der Dirac-Gleichung für $V_1(r)$ bestimmt man die reguläre Lösung bei $r=0$ ($\tilde{U}(r) \equiv \begin{pmatrix} \tilde{U}^{(1)}(r) \\ \tilde{U}^{(2)}(r) \end{pmatrix}$) und für $V_2(r)$ die exponentiell abfallende Lösung bei $r=\infty$ ($W(r) \equiv \begin{pmatrix} W^{(1)}(r) \\ W^{(2)}(r) \end{pmatrix}$). Es gilt dann

$$\Psi_b = c_1\,\theta(R-r)\,\tilde{U}(r) + c_2\,\theta(r-R)\,W(r)\,, \qquad c_1, c_2 = \text{const} \tag{5.1.1a}$$

Die Kontinuitätsbedingung bei $r=R$

$$c_1\,\tilde{U}(r)\Big|_{r=R-0} = c_2\,W(r)\Big|_{r=R+0} \tag{5.1.2a}$$

oder

$$\left(\frac{\tilde{U}^{(1)}(r)}{\tilde{U}^{(2)}(r)}\right)_{r=R} = \left(\frac{W^{(1)}(r)}{W^{(2)}(r)}\right)_{r=R} \tag{5.1.3a}$$

legt dann die Bindungsenergien fest. Diese sind äquivalent zu den Nullstellen der Wronski-Determinante (siehe Anhang D).

$$\mathcal{W}(E) = R^2\left(\tilde{U}^{(2)}(R)\,W^{(1)}(R) - W^{(2)}(R)\,\tilde{U}^{(1)}(R)\right) \tag{5.1.4}$$

Die Energieverschiebungen der Strahlungskorrekturen werden in üblicher Weise[5,15-29] mittels Störungstheorie in 1. Ordnung gemäß der Formel (z.B. für die Vakuum-Polarisation V_{VP}):

$$\Delta E_{VP} = \langle n\jmath\varkappa | V_{VP} | n\jmath\varkappa \rangle \tag{5.1.5}$$

berechnet, wobei $\Psi_{n,\jmath,\varkappa}(r)$ die Lösung der ungestörten Dirac-Gleichung

$$(-i\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + V(r) + \beta m - E_n)\,\Psi_{n,\jmath,\varkappa} = 0 \tag{5.1.6}$$

ist.

Im Gegensatz dazu möchte ich aus der numerischen Lösung der verallgemeinerten Dirac-Gleichung im Impulsraum die Energieniveaus und die Strahlungskorrekturen bestimmen. Wir werden sehen, daß man bei dieser Methode nicht die Wellenfunktionen kennen muß, und außerdem werden die Energieverschiebungen exakt berechnet (nicht störungstheoretisch).

Zunächst forme ich die verallgemeinerte Dirac-Gleichung (3.1.34) in die Integralgleichung

$$\Psi(\vec{p},E) = \frac{E + \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + m\gamma^0}{(2\pi)^3 (p^2 - E^2 - m^2)} \int d\vec{k}\; V(\vec{p},\vec{k})\,\Psi(\vec{k},E) \tag{5.1.7}$$

um, welche numerisch günstiger ist.

Da $V(\vec{p},\vec{k})$ ein kugelsymmetrisches Potential ist, vertauscht der Hamilton-Operator H mit J^2, J_z und $K = \beta(\vec{\sigma}\cdot\vec{L} + 1)$. Deshalb kann man für die Lösung der Dirac-Gleichung schreiben

$$\Psi(\vec{p}) \equiv \Psi_{\varkappa,\mu}(\vec{p}) = \begin{pmatrix} F^{(1)}_{\varkappa,E}(p)\;\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}) \\ F^{(2)}_{\varkappa,E}(p)\;\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}) & 0 \\ 0 & \chi^{\mu}_{-\varkappa}(\hat{p}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F^{(1)}_{\varkappa,E}(p) \\ F^{(2)}_{\varkappa,E}(p) \end{pmatrix}$$

$$\equiv \varphi_{\varkappa,\mu}(\hat{p})\,\Psi_{\varkappa,\mu}(p) \quad , \quad p = |\vec{p}|, \tag{5.1.8}$$

wobei $\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}) = \sum_{m} \langle \ell_{\varkappa}, \mu-m, \tfrac{1}{2} m | \jmath m \rangle\, Y_{\ell_{\varkappa},\mu-m}(\hat{p})\; |\tfrac{1}{2}, m\rangle.$ (5.1.9)

$$\ell_{\varkappa} = |\varkappa + \tfrac{1}{2}| - \tfrac{1}{2} \quad , \quad \jmath = |\varkappa| - \tfrac{1}{2}, \tag{5.1.10}$$

$$J^2\,\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}) = \jmath(\jmath+1)\,\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}), \tag{5.1.11}$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{L} + 1)\,\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}) = \varkappa\,\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}), \tag{5.1.12}$$

$$J_z\,\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}) = -\mu\,\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{p}), \tag{5.1.13}$$

$$\int d\hat{p}\; \varphi^{+}_{\varkappa\mu}(\hat{p})\,\varphi_{\varkappa'\mu'}(\hat{p}) = \delta_{\varkappa\varkappa'}\,\delta_{\mu\mu'}\;\mathbb{1} \tag{5.1.14}$$

und $\mathbb{1}$ die Einheitsmatrix ist. Aus (5.1.7), (5.1.8) und (5.1.14) ergibt sich die nach Partialwellen zerlegte Integral-Gleichung:

$$\Psi_{\kappa,E}(p) = G(p,E) \int_0^\infty dk\, k^2\, V_{\ell_\kappa}(p,k)\, \Psi_{\kappa,E}(k), \tag{5.1.15}$$

$$G(p,E) = \frac{1}{(2\pi)^3 (E^2 - p^2 - m^2)}, \tag{5.1.16}$$

$$V_{\ell_\kappa}(p,k) = \int d\hat{p} \int d\hat{k}\; \varphi^+_{\kappa,\mu}(\hat{p})\, (E + \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + m\gamma^0)\, V(\vec{p},\vec{k})\, \varphi_{\kappa,\mu}(\hat{k})$$

$$= \begin{pmatrix} E+m & -p \\ -p & E-m \end{pmatrix} \int d\hat{p} \int d\hat{k}\; \varphi^+_{\kappa,\mu}(\hat{p}) \Big[\sum_{\lambda m} \frac{4\pi}{2\lambda+1}\, Y^*_{\ell m}(\hat{k})\, Y_{\ell m}(\hat{p})\, g_\lambda(p,k) \Big] \varphi_{\kappa,\mu}(\hat{k}) \tag{5.1.17}$$

oder

$$V_{\ell_\kappa}(p,k) = \begin{pmatrix} \frac{E+m}{2\ell_\kappa+1}\, g_{\ell_\kappa}(p,k) & \frac{-p}{2\ell_{-\kappa}+1}\, g_{\ell_{-\kappa}}(p,k) \\ \frac{-p}{2\ell_\kappa+1}\, g_{\ell_\kappa}(p,k) & \frac{E-m}{2\ell_{-\kappa}+1}\, g_{\ell_{-\kappa}}(p,k) \end{pmatrix} \tag{5.1.18}$$

$$g_{\ell_\kappa}(p,k) = \frac{2\ell_\kappa+1}{2} \int_{-1}^{1} dx\; P_{\ell_\kappa}(x)\; V(\vec{p},\vec{k}), \qquad x = \cos\theta_{\vec{p},\vec{k}}. \tag{5.1.19}$$

$P_{\ell_\kappa}(x)$ sind die Legendreschen Funktionen.
Falls V_{ℓ_κ} keine Singularität hat, kann man die Gleichung (5.1.15) durch Diskretisierung z.B. nach Gauß-Punkten in der Form

$$\Psi_{\kappa,E}(p_i) = G(p_i,E) \sum_j W_j\, V_{\ell_\kappa}(p_i,p_j)\, \Psi_{\kappa,E}(p_j) \tag{5.1.20}$$

oder

$$\Psi(i) = \sum_j K(i,j)\Psi(j), \qquad K(i,j) \equiv G(p_i,E) W_j\, V_{\ell_\kappa}(p_i,p_j) \tag{5.1.21}$$

schreiben und mittels verschiedener Verfahren (siehe unten) die Energie der Bindungszustände ($E=m-e_b$) berechnen, wobei $\Psi(i)$ ein Vektor, $K(i,j)$ eine Matrix und W_j die Gauß-Gewichte sind. Da $V(\vec{p},\vec{k})$ zu $\frac{1}{p^2+k^2-2pkx}$ proportional ist, ist aus (5.1.19) ersichtlich, daß $V_{\ell_\kappa}(p,k)$ bzw. $g_{\ell_\kappa}(p,k)$ eine logarithmische Singularität der Art $\ln(p-k)^2$ besitzt. Die logarithmischen Singularitäten sind

integrierbar, und man kann sie normalerweise numerisch gut behandeln. In diesem Fall hängt die Singularität jedoch von der äußeren Variabel P ab und daher bewegt sich die Position der Singularität (K=P) mit der äußeren Variabel P. Deshalb ist die Verwendung einer solchen Diskretisierung wie in (5.1.20) wegen der Unendlichkeit bei $P_i=P_j$ nicht möglich. Um diese Schwierigkeit zu beseitigen, schlagen wir[50] hier eine modifizierte Spline-Interpolation für die Wellenfunktion vor: für die Interpolation einer Funktion Ψ kennt man normalerweise an bestimmten Stützstellen K_j die Stützwerte $\Psi(K_j)$. Dann wird ein algebraisches Polynom gesucht, das an den Stützstellen K_j die zugehörigen Stützwerte $\Psi(K_j)$ annimmt[51]. Die Anwendung solcher Verfahren ist in unserem Fall nicht möglich, da hier $\Psi(K)$ eine unbekannte Funktion ist. Aber es ist z.B. aus dem Ausdruck für die kubische Spline-Funktion $S^j(K)$ (j = 1, 2,...n die Anzahl der Intervalle, $P_j \leq K \leq P_{j+1}$) ersichtlich, daß die Funktionswerte an den Stützstellen $\Psi(P_j)$, $\Psi(P_{j+1})$,.... linear in den Ausdruck für $S^j(K)$ eingehen. D.h. man kann für jedes Intervall j die Spline-Funktion $S^j(K)$ in der Form:

$$S^j(K) = \sum_i S_i^j(K)\,\Psi(P_i)\ ,\ S^j(K_j) = \Psi(K_j) \qquad (5.1.22)$$

schreiben, wobei $S_i^j(K)$ in der Literatur[50] angegeben sind. Nun läßt man die Indizes j weg und bezeichnet die Menge aller $S_i^j(K)$ durch $S_i(K)$. Damit gilt:

$$\Psi^{inter}(K) = \sum_i S_i(K)\,\Psi(P_i) \qquad (5.1.23)$$

Nun setze ich näherungsweise für $\Psi_{\kappa,\varepsilon}(K)$ auf der rechten Seite von (5.1.15) die interpolierte Funktion aus (5.1.23) ein. Dann folgt:

$$\Psi_{\kappa,\varepsilon}(P) = G(P,\varepsilon) \sum_i \int_0^{k_{max}} dk\, K^2\, V_{\ell\kappa}(P,K)\, S_i(K)\, \Psi_{\kappa,\varepsilon}(P_i) \qquad (5.1.24a)$$

Um den Spline an den Randpunkten des Interpolationsintervalls $[a,b]$ eindeutig zu bestimmen, legt man im allgemeinen fest, daß die zweite Ableitung der zu interpolierenden Funktion Ψ an den Rändern verschwinden soll, d.h. $\Psi''(a) = 0 = \Psi''(b)$. Um dieses zu garantieren, setzen wir: $\Psi(P) = \frac{\Phi(P)}{P}$ und interpolieren $\Phi(P)$ anstelle von $\Psi(P)$. Damit gilt:

$$\Phi_{\chi,E}(P) = P \cdot G(P,E) \sum_i \int_0^{K_{max}} dK\, K\, V_{\ell_\chi}(P,K)\, S_i(K)\, \Phi_{\chi,E}(P_i) \cdot \qquad (5.1.24b)$$

Dabei habe ich das Integral $\int_0^\infty dK$ durch $\int_0^{K_{max}} dK$ ersetzt, da bei der Interpolation (siehe 5.1.23) die interpolierte Stelle K innerhalb der Stützstellen liegen muß. K_{max} wird genügend groß gewählt, so daß der Beitrag des Integrals $\int_{K_{max}}^\infty dK$ gegenüber dem Beitrag von $\int_0^{K_{max}} dK$ zu vernachlässigen ist. Die Wahl dieser Interpolation hat den Vorteil, daß die K-Integration nicht von der unbekannten Wellenfunktion abhängt und man deshalb die logarithmische Singularität behandeln kann:

$$I(P,P_i) \equiv \int_0^{K_{max}} dK\, K\, V_{\ell_\chi}(P,K)\, S_i(K) = \int_0^P dK\, K\, V_{\ell_\chi}(P,K)\, S_i(K)$$

$$+ \int_P^{K_{max}} dK\, K\, V_{\ell_\chi}(P,K)\, S_i(K) \cdot \qquad (5.1.25)$$

Nach den Transformationen $q=\sqrt{P-K}$ für das erste und $q=\sqrt{K-P}$ für das zweite Integral erhalte ich

$$I(P,P_i) = 2 \left\{ \int_0^{\sqrt{P}} dq\, q\, (P-q^2)\, V_{\ell_\chi}(P,(P-q^2))\, S_i(P-q^2) \right.$$

$$\left. + \int_0^{\sqrt{K_{max}-P}} dq\, q\, (P+q^2)\, V_{\ell_\chi}(P,(P+q^2))\, S_i(P+q^2) \right\} \cdot \qquad (5.1.26)$$

Wegen $\lim_{q\to 0} q \ln q = 0$ besitzen die Integrande nur noch eine hebbare Singularität an den unteren Integrationsgrenzen.
Nach der K- und der X-Integration und der Diskretisierung von P erhalte ich:

$$\Phi_{\chi,E}(P_j) = P_j\, G(P_j,E) \sum_{i=1}^{N} I(P_j,P_i)\, \Phi_{\chi,E}(P_i) \equiv \sum_i A(P_j,P_i)\, \Phi_{\chi,E}(P_i) \qquad (5.1.27)$$

oder in Matrix-Schreibweise:

$$\Phi = A\Phi \,, \qquad (5.1.28)$$

wobei Φ ein Vektor der Dimension N und A eine Matrix der Dimension NxN ist. Zur Berechnung der Energie des $^1S_{1/2}$-Bindungszustands ($\chi=-1$) variiere ich in der Gleichung

$$A\Phi_i = \lambda_i(E)\, \Phi_i \qquad i = 1,2,\ldots N \qquad (5.1.29)$$

die Energie E, so daß der größte positive Eigenwert gleich eins wird. Dies kann mittels verschiedener Verfahren geschehen:

a) Man berechnet für gegebene E einfach alle Eigenwerte der Matrix A und variiert E, bis der größte positive Eigenwert eins wird. Hierzu kann man z.B. EISPACK-Subroutine[52] benutzen.

b) Mit Hilfe des Malfliet-Tjon-Verfahrens[53] findet man auf folgende Weise den größten Eigenwert der Gleichung (5.1.29): zuerst definiert man eine Hilfsfunktion φ

$$\varphi = \varphi_0 + A\varphi = \varphi_0 + A\varphi_0 + A^2\varphi_0 + \cdots \equiv \varphi_0 + \varphi^{(1)} + \varphi^{(2)} + \varphi^{(3)} + \cdots\cdots, \tag{5.1.30}$$

wobei φ_0 eine beliebige Funktion ist (z.B. $\varphi_0 = 1$). Danach entwickelt man φ_0 nach dem vollständigen Satz von Wellenfunktionen ψ_i (ψ_i sind die Eigenfunktionen zu A)

$$\varphi_0 = \sum_i^N c_i \psi_i \,. \tag{5.1.31}$$

Damit ergibt sich für

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\varphi^{(n+1)}}{\varphi^{(n)}} = \lim_{n\to\infty} \frac{A^{(n+1)}\varphi_0}{A^{(n)}\varphi_0} = \lim_{n\to\infty} \frac{A^{(n+1)}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots)}{A^{(n)}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots)}$$

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{c_1 \lambda_1^{(n+1)}(E) + c_2 \lambda_2^{(n+1)}(E) + \cdots}{c_1 \lambda_1^{(n)}(E) + c_2 \lambda_2^{(n)}(E) + \cdots} \,. \tag{5.1.32}$$

Sei $\lambda_i(E)$ vom Betrag her der größte Eigenwert, dann dominiert der Term

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\varphi^{(n+1)}}{\varphi^{(n)}} = \frac{c_i \lambda_i^{(n+1)}(E)}{c_i \lambda_i^{(n)}(E)} = \lambda_i(E) \,. \tag{5.1.33}$$

Sind alle Eigenwerte von A positiv, dann wird für die Bindungsenergie $\lambda_i(E) = 1$. Falls außer positiven Eigenwerten auch negative Eigenwerte größer als eins existieren, dann funktioniert dieses Verfahren nicht mehr.

c) Man geht wiederum von der Hilfsgleichung (5.1.30) und (5.1.31) aus und stellt mit Hilfe der Padé-Approximation[54] φ als Quotient von zwei Polynomen P und Q dar:

$$\varphi(P) = \frac{P}{Q} \,, \quad \varphi^{-1}(P) = \frac{Q}{P} \,. \tag{5.1.34}$$

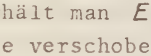
Aus der Summation der rechten Seite der Gleichung (5.1.30) in der Form

$$\varphi(P) = \varphi_0 + A\varphi_0 + A^2\varphi_0 + \cdots\cdots = \frac{1}{1-A}\,\varphi_0$$
$$= \sum \frac{1}{1-\lambda_j(E)}\, c_j \Psi_j(P) \qquad (5.1.35)$$

ist ersichtlich, daß im Gegensatz zum Malfliet-Tjon-Verfahren nur $\lambda_i \approx 1$ der dominante Term ist und daß gilt:

$$\varphi(P) \underset{\lambda_i \to 1}{\longrightarrow} \frac{1}{1-\lambda_j(E)}\, c_i \Psi_i(P) \longrightarrow \infty \,. \qquad (5.1.36)$$

D.h. für eine beliebige Stützstelle P bildet man nach Padé den Quotienten $\frac{Q}{P}$ und variiert E bis $\frac{Q}{P} \to 0$ geht, dann ist E die gesuchte Energie. Um sicher zu stellen, daß der Eigenwert $\lambda_i \neq 1$ der größte positive Eigenwert ist, muß man mit der Energiesuche weit unten anfangen, um den Grundzustand zu finden.

Die obige Diskussion über die Berechnung der Bindungsenergie ist für jedes kugelsymmetrische Potential gültig. Z.B. für $V = V^\circ \equiv$ erhält man $E_{1S_{1/2}}(V^\circ)$ und für $V = V^\circ + V_{UE} \equiv$  bekommt man die verschobenen Bindungsenergien, bezeichnet mit $E_{1S1/2}(V^\circ + V_{UE})$. Dann ist

$$\Delta E^{V_{UE}}_{1S_{1/2}} = E_{1S_{1/2}}(V^\circ + V_{UE}) - E_{1S_{1/2}}(V^\circ) \qquad (5.1.37)$$

die exakte Energieverschiebung aufgrund der Vakuum-Polarisationskorrektur der Ordnung $\propto (Z\alpha)$. Analog kann man die Energieverschiebungen bezüglich jeder Strahlungskorrektur errechnen.

5.1.1 X-Integration

Die Winkelintegration in der Gleichung (5.1.19) ist von der Form

$$I_x \equiv \int_{-1}^{1} dx\ P_\ell(x)\ \frac{f(q)}{p^2+k^2-2pkx}\ , \tag{5.1.38}$$

wobei $q = |\vec{q}| = \sqrt{p^2+k^2-2pkx}$ ist und $f(q)$ ist eine bekannte Funktion mit $f(q) \xrightarrow{q\to 0}$ endlich. Für $q \neq 0$ läßt sich I_x näherungsweise mittels Gauß-Integration berechnen. Für $q \longrightarrow 0$ bzw. $x \longrightarrow \frac{p^2+k^2}{2pk}$ $(-1 \leq x \leq 1)$ wird der Integrand in (5.1.38) singulär. In diesem Fall ($q \to 0$) ziehe ich die Singularität vom Integranden ab.

$$I_x \equiv \int_{-1}^{1} dx\ P_\ell(x)\ \frac{f(q)-f(0)}{p^2+k^2-2pkx} + f(0)\int_{-1}^{1} dx\ P_\ell(x)\ \frac{1}{p^2+k^2-2pkx} \tag{5.1.39}$$

$$= \int_{-1}^{1} dx\ P_\ell(x)\ \frac{f(q)-f(0)}{p^2+k^2-2pkx} + f(0)\frac{1}{4pk}\ Q_\ell\left(\frac{p^2+k^2}{2pk}\right). \tag{5.1.40}$$

Dabei ist $Q_\ell\left(\frac{p^2+k^2}{2pk}\right)$ die Legendresche Funktion zweiter Art. Der erste Term in (5.1.40) wird durch die Gauß-Integration berechnet. Der zweite Term ist nun für den Fall P=K logarithmisch singulär und wie schon in Abschnitt 5.1 erwähnt, wird er bei der K-Integration berücksichtigt ($\lim_{q\to 0} q \ln q \to 0$). Ich brauche 10-12 Gauß-Punkte für ein auf sieben Stellen genaues Ergebnis $E_{1S_{1/2}}(V^0$ bezüglich der X-Integration. Man braucht bei der Errechnung von $E_{1S_{1/2}}(V^0 + V_{UE})$ mehr Gauß-Punkte (etwa 24-32).

5.1.2 K-Integration

Bei der K-Integration in (5.1.25-26) wahle ich zunächst den Wert von K_{max} groß genug (etwa 122 Mev für $Z > 140$ und ungefähr 100 Mev für $Z \leq 140$), so daß man sicher ist, daß die Endergebnisse ($E'^{S}_{1S_{1/2}}$) im Rahmen unserer Genauigkeit (etwa ± 2 in der 5. Stelle für $Z > 140$ und ± 4 in der 6. Stelle für $Z \leq 140$) für $E'^{S}_{1S_{1/2}}$ nicht von der Wahl von K_{max} abhängt (siehe z.B. Tabelle 5.1 Aus der Abb. 5.1.ist ersichtlich, daß man für höhere Z eine größere K_{max} braucht.

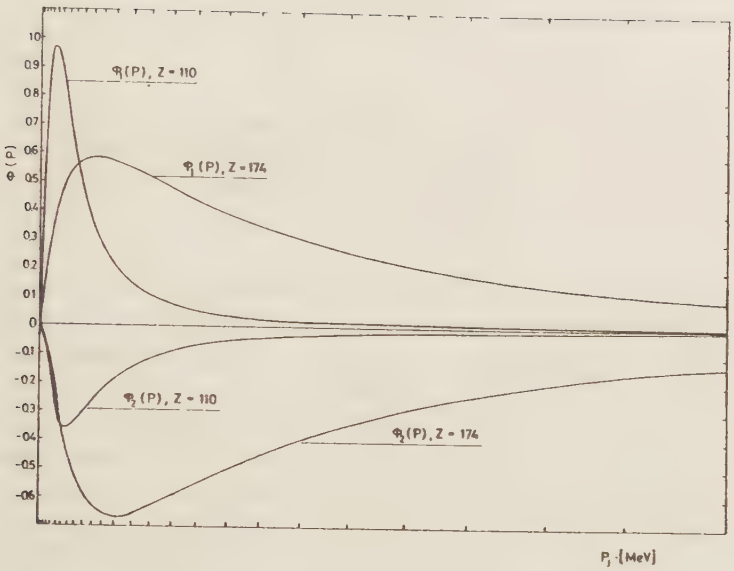


Abb. 5.1 Impulsraumdarstellung der Wellenfunktion eines Elektrons im Feld eines ausgedehnten Kerns (Modell I; R=10 fm, Z=110 bzw. Z=174) für den Grundzustand (Φ_1 = große Komponente, Φ_2 = kleine Komponente).

K_{max} (Mev)	$E_{1S_{1/2}}$ (Mev)
100.3	-0.49302
110.7	-0.49311
116.2	-0.49314
119.0	-0.49315
121.8	-0.49316
127.8	-0.49316
133.8	-0.49316

Tabelle 5.1 Die K_{max}-Abhängigkeit der 1S -Energie des Elektrons im Coulomb-Feld eines ausgedehnten Kerns (Modell I) der Ladungszahl Z=174.

Das K-Integral in (5.1.25-26) berechne ich mittels Gauß-Integration. Für eine Genauigkeit von etwa vier Stellen im Endergebnis braucht man für die beiden Integrale insgesamt etwa 104 Gauß-Punkte. Für die höhere Genauigkeit, die hier erforderlich ist, zerlege ich die K-Integrale in NS K-Integrale (NS=Anzahl der Stützstellen, siehe unten). Dann verwende ich für jedes Integral etwa 20 Gauß-Punkte (für mindestens 6 Stellen Genauigkeit).
Die Werte von $E'^{S}_{1S_{1/2}}$ hängen auch von der Interpolation der Wellenfunktionen ab (siehe Gleichungen 5.1.23-24). Für eine gute Interpolation legt man mehr Stützstellen P_j in Bereiche, in denen die Funktion stark variiert. Deshalb habe ich die Länge der Intervalle

$$h(P_j) = P_{j+1} - P_j \quad , \quad j = 1,2,3,\ldots NS \tag{5.1.41}$$

an die Form der Wellenfunktion $\Phi(P)$ angepaßt, indem ich zunächst $\Phi(P)$ grob für eine beliebige Verteilung von Stützstellen (siehe Abb. 5.1) berechnet habe. Dann lege ich die Länge der Intervalle an einigen Stellen P_α aus dem Verlauf von $\Phi(P)$ fest ($\bar{h}(P_\alpha)$). Damit schreibe ich

$$h(p_j) = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} S_\alpha(p_j)\,\tilde{h}(p_\alpha) \qquad (5.1.42)$$

D.h. ich lege die übrige $h(p_j)$ durch eine Spline-Interpolation fest. Tabelle 5.2 stellt die Abhängigkeit der Resultate für Z=174 von der Anzahl der Stützstellen (NS) dar.

NS	$E_{1S_{1/2}}$ (Mev)
45	-0.493080
50	-0.493111
60	-0.493138
70	-0.493149
80	-0.493153
90	-0.493156
100	-0.493157

Tabelle 5.2 Ein Beispiel für die Abhängigkeit der $E_{1S_{1/2}}$-Energie des Elektrons im Coulomb-Feld eines ausgedehnten Kerns (Modell I) der Ladungszahl Z=174 von der Anzahl der Stützstellen NS. Hier ist $K_{max} \approx 122$ Mev.

Für $Z \leqslant 140$ erhält man bei der gleichen Anzahl von Stützstellen genauere Werte für $E_{1S_{1/2}}$, da man, wie schon erwähnt, für niedrige Z kleinere K_{max} braucht.

5.1.3 Vergleich verschiedener Methoden zur Eigenwertbestimmung

Ich habe festgestellt, daß man nur bis zu Z=150 die Bindungsenergien und die dazugehörigen Korrekturen mittels Malfliet-Tjon-Verfahrens bestimmen kann, da ab $Z > 150$ negative Eigenwerte mit einem Betrag größer als eins vorkommen. Hier braucht man für Z=100 etwa 36-40 Iterationen und für Z=150 ungefähr 180-200 Iterationen.
Anhand des Padé-Verfahrens konnte ich für den 1S-Zustand die Energie $E_{1S_{1/2}}$ für alle $Z < Z_c$ bestimmen. Im allgemeinen braucht man bei diesem Verfahren weniger Iterationen als beim Malfliet Tjon-Verfahren.
Die Resultate des Malfliet-Tjon- und des Padé-Verfahrens stimmen mit den Ergebnissen, die ich mittels fertiger Subroutinen, wie z.B. EISPACK,IMSL, berechnet habe, überein. Die dritte Methode ist am einfachsten, aber man braucht dazu mehr Speicherplatz als bei den anderen Methoden.

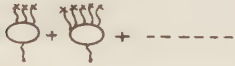
5.2 Potentialberechnung

Für die potentielle Energie des Elektrons ($V=e\Phi$, Φ =elektrostatisches Kern-Potential) in der verallgemeinerten Dirac-Gleichung (3.1.34) nehme ich nur den Anteil

$$V = V^{\circ} + V_{UE} + V^{+3} = V^{\circ} + V_{VP} ,$$

$V^{\circ} =$

$V_{UE} =$

$V^{+3} =$ 

mit. Die Rechnungen stellten sich als so umfangreich heraus, daß der Selbstenergieanteil nicht mehr berücksichtigt werden konnte. Die Ausdrücke für die Potentiale sind gegeben durch:

$$V^{\circ}(q) = \frac{-Ze^2}{q^2} F^{\circ}(q) , \tag{5.2.1a}$$

$$V_{UE}(q) = \frac{-Ze^2}{q^2} F^{\circ}(q) \left\{ \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^1 dy\, y(1-y) \ln\left(1 + \frac{q^2 y(1-y)}{m^2 - i\varepsilon}\right) \right\} \tag{5.2.2a}$$

$$= \frac{-Ze^2}{q^2} F^{\circ}(q) \left\{ \frac{-\alpha}{3\pi} \left[\frac{5}{3} - \frac{4}{a} - \left(1 - \frac{2}{a}\right)\sqrt{1+\frac{4}{a}}\, \ln\left(\frac{\sqrt{1+\frac{4}{a}} + 1}{\sqrt{1+\frac{4}{a}} - 1} \right) \right] \right\}$$

$$\equiv -\frac{-Ze^2}{q^2} F_{UE}(q) , \tag{5.2.3}$$

$$a = \frac{q^2}{m^2} , \quad F^{\circ}(0) = 1 , \quad F_{UE}(0) = 0 , \quad q = |\vec{q}| , \tag{5.2.4}$$

$$V^{+3}(q) \simeq -\frac{|q|}{q^2} 4\pi \int_0^{\infty} dr\, r^2 j_0(qr) \rho^{+3}_{|1|}(r) \equiv -\frac{|e|}{q^2} F^{+3}(q, Z\alpha), \tag{5.2.5}$$

$$\rho^{+3}_{|1|}(r) = -\frac{|e|}{2\pi} \left\{ \sum_{-m<E_n<0} \left[|\Psi_{1,E_n}(r)|^2 + |\Psi_{-1,E_n}(r)|^2 \right] \right.$$

$$+ \frac{Re}{\pi} \int_0^{\infty} dy \left[Sp\left(G_1(Z\alpha, r, r, iy)\right) - Sp\left(G_1(-Z\alpha, r, r, iy)\right) \right.$$

$$\left. \left. - 2Z\alpha\, Sp\left(G_1'(r, r, iy)\right) \right] \right\} . \tag{5.2.6}$$

Das Uehling-Potential ($V_{UE}(q)$) wurde vom entsprechenden Feynman-Diagramm nach der Forderung der Eichinvarianz und der Ladungsrenormierung hergeleitet (dazu siehe Jauch und Rohrlich[32]). Also muß ich nur $V^{+3}(q)$ numerisch bestimmen, welches durch die induzierte Vakuum-Polarisationsdichte $\rho^{+3}_{111}(r)$ gegeben ist.

5.2.1 Bestimmung von $\rho^{+3}_{111}(r)$

Im folgenden erläutere ich, wie ich die einzelnen Anteile der induzierten Ladungsdichte $sp(G_1), sp(G_1'), |\Psi|^2$ und die Y-Integration numerisch behandelt habe.

5.2.1.1 Berechnung von $sp(G^{><}_{k=1}), sp(G'^{><}_{k=1})$ und der Y-Integration

Die Ausdrücke für $sp(G_1)$ für $r > R$ und für $r < R$ sind in Abschnitt 4.3 gegeben. Daraus erkennt man, daß $sp(G_1^{><})$ nur aus einer Kombination der Whittaker-Funktionen $M_{k,\mu}(x)$ und $W_{k,\mu}(x)$ besteht. In Anhang E erläutere ich die Technik, mit der ich die Whittaker-Funktionen mittels ihrer Integraldarstellungen errechnet habe. Zum Test der berechneten Whittaker-Funktionen habe ich folgende Relationen[55] verwendet:

1) $(\kappa+\mu+\frac{1}{2})\,W_{k,\mu}(x) + W_{k+1,\mu}(x) = \sqrt{x}\;\; W_{k+\frac{1}{2},\mu+\frac{1}{2}}(x)$

2) $\int^{c}_{x}(w) = [M,W]_R = 4(m+w)\,\lambda^2\;\; \frac{\Gamma(2s+1)}{\Gamma(s-\nu)}$

3) $(2\mu+1)\left[M_{k,\mu}(x) - M_{k+1,\mu}(x)\right] = \sqrt{x}\;\; M_{k+1,\mu+\frac{1}{2}}(x)$

4) $\Psi(1,1,x) = e^{x}\,E_1(x)$

wobei die zweite Relation in Anhang D.2 gegeben ist. Dabei braucht man etwa 24 Gauß-Punkte für eine Genauigkeit von ungefähr sieben Stellen.
Für die Berechnung der $sp(G_1'^{><}(r,r,\vartheta))$ ist die Errechnung von $ch_1(x)$ (Integralkosinus-hyperbolikus) und $E_1(x)$ (Integralexponentialfunktion) erforderlich. $E_1(x)$ ist durch die Relation (4)

gegeben. Die Technik, mit der ich chi(x) bestimmt habe, wird in Anhang F diskutiert. Zum Test der berechneten chi(x) habe ich die folgende Relation[56] benutzt:

$$chi(x) = \frac{1}{2}\left[E_i(x) - E_1(x)\right] \quad , x>0 \,.$$

Für eine Genauigkeit von etwa acht Stellen braucht man hier 20 Gauß-Punkte. Die Werte für $E_i(x)$ und $E_1(x)$ sind für $5 \leqslant X \leqslant 10$ in Literatur 56 und für den Bereich $0.2 < X < 80$ in Literatur 57 tabellarisiert.
Für die Y-Integration habe ich das Y-Integral in vier Intervalle zerlegt, und für eine Genauigkeit von mindestens sieben Stellen wurden in jedes Intervall etwa 24-32 Gauß-Punkte gelegt.

5.2.1.2 Berechnung der Elektronendichte $|\Psi_{\kappa,E_n}(r)|^2$

Die radiale Elektronendichte der Bindungszustände $|\Psi_{\kappa,E_n}(r)|^2$ läßt sich leicht aus dem Residuum der $sp(G_\kappa(z\alpha,r,r,\omega))$ bestimmen, denn es gilt (siehe etwa Gleichung (4.1.46)):

$$sp(G_\kappa(z\alpha,r,r,\omega)) = \sum_{E_n} \frac{|\Psi_{\kappa,E_n}(r)|^2}{E_n-\omega} \,. \tag{5.2.7}$$

Dann folgt aus dem Residuum der $sp(G_\kappa)$ an der Stelle $\omega = E_n$

$$Res\left[sp(G_\kappa(z\alpha,r,r,\omega))\right]\Big|_{\omega=E_n} = -|\Psi_{\kappa,E_n}(r)|^2, \tag{5.2.8}$$

wobei E_n die Energie des Bindungszustandes ist, für den man die Elektronendichte errechnen will. Andererseits ist die Spur der Greensfunktion eines Elektrons im äußeren Potential durch (4.3.10)

$$sp(G_\kappa(z\alpha,r,r,\omega)) = \begin{cases} sp(\tilde{G}^o_\kappa(r,r,\tilde{\omega})) + \dfrac{\tilde{a}_\kappa}{J_\kappa(\omega)}(\tilde{u}\tilde{u})_r & r \leqslant R \\ sp(G^c_\kappa(r,r,\omega)) + \dfrac{b_\kappa}{J_\kappa(\omega)}(ww)_r & r \geqslant R \end{cases} \tag{5.2.9}$$

gegeben, wobei $sp(\tilde{G}^o_\kappa)$, $sp(G^c_\kappa)$, $\tilde{a}_\kappa$, b_κ, $(\tilde{u}\tilde{u})_r$, $(ww)_r$ und die Wronski-Determinante $J_\kappa(\omega)$ in Anhang D.1-2 und in Abschnitt 4.3 definiert sind. Aus dem Vergleich von (5.2.9) und (5.2.8) ergibt sich:

$$|\Psi_{\chi,E_n}(r)|^2 = \frac{1}{\frac{d}{d\omega}(J_\chi(\omega))|_{\omega=E_n}} \begin{cases} \tilde{a}_\chi\,(\tilde{u}\tilde{u})_r\,|_{\omega=E_n} & r\leq R \\ b_\chi\,(WW)_r|_{\omega=E_n} & r\geq R \end{cases} \quad (5.2.10)$$

Dabei ist $(\tilde{u}\tilde{u})_r$ analytisch gegeben, aber $\tilde{a}_\chi, b_\chi$ und $(WW)_r$ berechnet man mit Hilfe der Whittaker-Funktionen. Die Ableitung der Wronski-Determinante habe ich näherungsweise mittels der 5-Punkt-Formel für die Differentation[56] bestimmt. Zum Test der so erhaltenen Elektronendichte habe ich die Normierung der Wellenfunktion

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, |\Psi_{\chi,E_n}(r)|^2 = 1 \quad (5.2.11)$$

benutzt. Dabei war im allgemeinen der relative Fehler für alle $1S_{1/2}$- und $2P_{1/2}$-Zustände $\leq 10^{-6}$.

5.2.2 Berechnung von $V^{+3}(q)$

Man muß nach der numerischen Bestimmung der induzierten Ladungsdichte $\rho^{+3}_{111}(r)$ nun die r-Integration in (5.2.4) durchführen, um $V^{+3}(q)$ zu gewinnen. Da der Integrand den Term $\sin(qr)$ enthält, oszilliert er für $qr \gg 1$ stark, und deshalb ist die Anwendung der Gauß-Methode hier nicht günstig. Für die Berechnung von $V^{+3}(q)$ zerlege ich das Integral in (5.2.5) in zwei Teile:

$$V^{+3}(q) \approx \frac{-|e|}{q^2}\, 4\pi \left[\int_0^R dr\, r^2\, j_0(qr)\, \rho^{+3}_{111}(r) + \int_R^\infty dr\, r^2\, j_0(qr)\, \rho^{+3}_{H1}(r) \right]. \quad (5.2.12)$$

Aus der K-Integration in Abschnitt (5.1.2) ist bekannt, daß $K_{max} \approx 122$ Mev ist. Damit ist $q_{max} < 2\,K_{max} \leq 244$ Mev. Da im ersten Integral $r_{max}=R \approx 10$ fm ≈ 0.05 Mev, ist $(qr)_{max} \leq 3.8\,\pi$ ($\pi \doteq 3.14$). D.h. hier oszilliert der Integrand nicht so stark und daher kann man hier die Gauß-Integration anwenden. Für eine Genauigkeit von etwa sieben Stellen benötigt man ungefähr 40 Gauß-Punkte.

Das zweite Integral, in dem der Integrand stark oszilliert, habe ich zunächst in drei Teile (wegen des Verlaufs von $\rho^{+3}_{H1}(r)$ siehe Abb. 6.4) zerlegt:

$$\int_R^\infty dr = \int_R^{.6} dr + \int_{.6}^{10} dr + \int_{10}^{r_{max}} dr \quad . \tag{5.2.13}$$

Dabei wird r_{max} genügend groß gewählt, so daß die Endergebnisse unabhängig von r_{max} werden. Aus den numerischen Erfahrungen ergibt sich der Wert $r_{max} \approx 25$ Mev^{-1} . Nun berechne ich jedes Integral in (5.2.13) näherungsweise mittels Filon-Methode[56,58], bei der man den Integrationsbereich $[a,b]$ des Integrals

$$I = \int_a^b dr \, \sin qr \, f(r) \tag{5.2.14}$$

in 2N Teilintervalle der Länge $h = \frac{b-a}{2N}$ zerlegt. Dann interpoliert man die Funktion $f(r)$ in jedem Intervall $[a_{i-1} = a+(i-1)h, a_{i+1} = a+(i+1)h]$ durch eine Parabel:

$$P_i(r) \equiv A + B(r-a_i) + C(r-a_i)^2, \qquad a_{i-1} \leqslant r \leqslant a_{i+1}, \tag{5.2.15}$$

$$P_i(a_i) = f(a_i), \tag{5.2.16}$$

$$P_i(a_{i-1}) = f(a_{i-1}), \tag{5.2.17}$$

$$P_i(a_{i+1}) = f(a_{i+1}). \tag{5.2.18}$$

Aus den Gleichungen (5.2.15-18) ergibt sich:

$$A = f(a_i) \tag{5.2.19}$$

$$B = [f(a_{i+1}) - f(a_{i-1}) - 4f(a_i)]/2h \tag{5.2.20}$$

$$C = [f(a_{i+1}) + f(a_{i-1}) - 2f(a_i)]/2h^2 \tag{5.2.21}$$

$$\left.\frac{dP_i(r)}{dr}\right|_{r=a_{i+1}} = [(3f(a_{i+1}) + f(a_{i-1}) - 4f(a_i)]/2h \tag{5.2.22}$$

$$\left.\frac{dP_i(r)}{dr}\right|_{r=a_{i-1}} = [4f(a_i) - f(a_{i+1}) - 3f(a_{i-1})]/2h \tag{5.2.23}$$

Nun schreibe ich:

$$I \approx \sum_{i=1,3,5,\cdots} \int_{a_{i-1}}^{a_{i+1}} dr \, \sin qr \, P_i(r) \equiv \sum_{i=1,3,\cdots} I_i(q) \, . \tag{5.2.24}$$

Durch partielle Integration von $I_i(q)$ unter Verwendung der Relationen (5.2.19-5.2.23) und den folgenden Beziehungen

$$\theta \equiv q \cdot h \tag{2.2.25}$$

$$\cos(q \cdot a_{i+1}) = \cos(q \cdot a_i) \cdot \cos\theta - \sin\theta \sin(q \cdot a_i) \tag{2.2.26}$$

$$\cos(q \cdot a_{i-1}) = \cos(q \cdot a_i) \cos\theta + \sin\theta \sin(q \cdot a_i) \tag{2.2.27}$$

ergibt sich:

$$I \approx h \left\{ \alpha^{(1)}(\theta) \left[f(a) \cdot \cos(a \cdot q) - f(b) \cdot \cos(b \cdot q) \right] + \beta^{(1)}(\theta) \cdot S_{2N} + \gamma^{(1)}(\theta) S_{2N-1} \right\}, \tag{2.2.28}$$

$$\alpha^{(1)}(\theta) \equiv \frac{1}{\theta} + \frac{\sin 2\theta}{2\theta^2} - \frac{2\sin^2\theta}{\theta^3}, \tag{2.2.29}$$

$$\beta^{(1)}(\theta) \equiv 2\left(\frac{1+\cos^2\theta}{\theta^2} - \frac{\sin 2\theta}{\theta^3} \right), \tag{2.2.30}$$

$$\gamma^{(1)}(\theta) \equiv 4\left(\frac{\sin\theta}{\theta^3} - \frac{\cos\theta}{\theta^2} \right), \tag{2.2.31}$$

$$S_{2N} \equiv \sum_{i=0}^{N} f(a_{2i}) \cdot \sin(q \cdot a_{2i}) - \frac{1}{2}\left[f(b) \sin(b \cdot a) + f(a) \cos(q \cdot a) \right], \tag{2.2.32}$$

$$S_{2N-1} \equiv \sum_{i=1}^{N} f(a_{2i-1}) \cdot \sin(q \cdot a_{2i-1}). \tag{2.2.33}$$

Für jedes Integral habe ich 80 Stützstellen (2N=80) genommen, obwohl ich bereits für 2N=40 eine Genauigkeit von sechs Stellen bei den Endergebnissen (Bindungsenergien) festgestellt habe.

6. Resultate

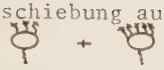
In Kapitel 5 wurde gezeigt, wie man die verallgemeinerte Dirac-Gleichung im Impulsraum numerisch lösen kann. Damit möchte ich hier die Rechnungen im Ortsraum überprüfen. Es ist anzumerken, daß die bisherigen Rechnungen bezüglich der Strahlungskorrekturen mittels 1.Ordnung Störungstheorie errechnet wurden, während ich diese Korrektur exakt mitgenommen habe.
Als erstes habe ich die Gesamtenergie des 1S-Niveaus ($E_{1S_{1/2}} = m - \varepsilon_b$, ε_b = Bindungsenergie) und die dazugehörige Vakuum-Polarisationskorrektur der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ (Uehling-Potential) numerisch berechnet. Um diese mit den Ergebnissen von Greiner[5] zu vergleichen, habe ich zunächst dieselbe Ladungsverteilung für den Kern und dieselbe Elektron-Masse genommen (siehe Tabelle 6.1).
Aus dem Vergleich der beiden Resultate ergibt sich:

1. Die von Greiner angegebenen Werte bezüglich der Gesamtenergie des 1S-Niveaus sind vom Betrag her ungefähr 40 ev kleiner als meine Resultate (mit Ausnahme Z=140), d.h. es liegt ein Unterschied von etwa 0.011% bei Z=100 und 0.017% bei Z=160 vor.
2. Im Rahmen der angegebenen Genauigkeit von Greiner stimmen die Energieverschiebungen nur für $Z \leq 110$ überein, während für höhere Z meine Ergebnisse vom Betrag her etwas größer sind, z.B. 2.1% bei Z=160 (etwa 150 ev). Dabei ist meine Genauigkeit etwa gleich.
3. Die angegebene kritische Ladungszahl von Greiner (Z_c=169) ist nicht richtig, da das 1S-Niveau bei Z=169 erst den Wert -0.47049 Mev erreicht. Aus der Extrapolation der 1S-Kurve ergibt sich $Z_c \approx 170$.

Von gewissen kleinen Unstimmigkeiten abgesehen zeigt dies, daß die Rechnungen im Impulsraum erfolgreich durchgeführt werden können. Im Fall der Energieverschiebung durch das Uehling-Potential macht sich eine Diskrepanz zwischen der 1.Ordnung Störungstheorie und unserer exakten Rechnung nur für $Z \geq 150$ bemerkbar.

Z	100	110	120	130	140	150	160	169
Greiner $E_{1S_{1/2}}$ (Mev)	0.34983	0.30613	0.25140	0.18057	0.08511	-0.04876	-0.23868	
Impulsraum $E_{1S_{1/2}}$ (Mev)	0.34987	0.30617	0.25144	0.18062	0.08511	-0.04878	-0.23872	-0.47049
Greiner $\Delta E^{V_{UE}}_{1S_{1/2}}$ (Mev)	-0.00015	-0.00028	-0.00052	-0.00101	-0.00200	-0.00389	-0.00711	
Impulsraum $\Delta E^{V_{UE}}_{1S_{1/2}}$ (Mev)	-0.00015	-0.00028	-0.00053	-0.00102	-0.00203	-0.00395	-0.00726	-0.01146

Tabelle 6.1 Die Grundzustandsenergie ($E_{1S_{1/2}}$) des Elektrons und die Energieverschiebung aufgrund des Uehling-Potentials $\Delta E^{V_{UE}}_{1S_{1/2}}$ im Potential einer homogen geladenen Kugel mit dem Radius $R=1.2\ A^{1/3}$, $A=0.00733\ Z^2 + 1.30\ Z + 63.6$ (Z=Kernladungszahl). Dabei ist $\frac{1}{m} = \lambda\!\!\!^{-}_e = 386.14$ fm.

Als nächstes möchte ich die Energieverschiebung aufgrund des Vakuum-Polarisationspotentials $V^{+3} =$  berechnen. Bevor ich dies tue, untersuche ich die Wirkung der verschiedenen Modelle (für die Ladungsverteilung des Kerns) auf die Bindungsenergien des Elektrons. Wie man aus Abb. 6.1 sieht, bleibt die Bindungsenergie des Elektrons für kleinere Z für die beiden Modelle etwa gleich, während man für höhere Z einen mit Z wachsenden Unterschied bemerkt. Diese Abweichung ist jedoch nicht groß, sie beträgt bei Z=170 etwa 89.33 Kev. Deshalb nehme ich für alle folgenden Berechnungen Modell I für die Ladungsverteilung des Kerns, wodurch die Berechnungen von V^{+3} erleichert werden. Außerdem benutze ich folgende Parameter:

m = 0.5110041 Mev

$\alpha = \frac{e^2}{4\pi} = 1./137.03602$

R = 10 fm

$\hbar c$ = 197.32891 Mev fm

Für die Bestimmung von V^{+3} mußte ich zunächst die induzierte Vakuum-Polarisationsdichte $\rho^{+3}_{|x|=1}(r)$ (siehe 4.2.19 und 4.2.17) numerisch berechnen. Dazu ist die Berechnung der Elektronenwahrscheinlichkeitsdichten für den Energiebereich $-m < E < 0$ erforderlich. Mit Hilfe der Abb. 6.2 habe ich näherungsweise die Werte für Z bestimmt, für die die Eigenwerte der $1S_{1/2}$- und $2P_{1/2}$-Zustände in diesem Energieintervall liegen. Diese sind: $148.49 < Z < Z_c \approx 174.6$ für den $1S_{1/2}$- und $171.9 < Z < 189.4$ für den $2P_{1/2}$-Zustand. Um einen Eindruck von der Elektronendichte zu gewinnen, ist in Abb. 6.3 $r^2|\psi_{1S_{1/2}}(r)|^2$ für verschiedene Z dargestellt. Auffällig ist hier der stärker werdende Abfall der Elektronendichte $r^2|\psi_{1S_{1/2}}(r)|^2$ und die Verschiebung ihres Maximums nach links mit wachsender Ladungszahl Z. Dies kann man [7] sich anhand des asymptotischen Verhaltens der Wellenfunktion für die Bindungszustände bei $E \to -m$ bzw. $Z \to Z_c$ klar machen. (Für $E = -m$ und $r \to \infty$ verhalten sich die kleine - und die große Komponente des Bindungszustands $1S_{1/2}$ wie $r^{1/4} e^{\sqrt{2m}\,Z\alpha r}$ und damit verhält sich $r^2|\psi_{1S_{1/2}}(r)|^2$ wie $r^{5/2}\, e^{-2\sqrt{2m}\,Z\alpha r}$

In der Abb. 6.4 wurde $\rho^{+3}_{|1|}$ für Z=170 dargestellt. Dieser Verlauf ist typisch für alle Z. D.h. sie haben in der Nähe des Kern-Radius, wo das elektrische Feld des Kerns am stärksten ist, vom Betrag her ein Maximum und sie gehen in der Umgebung $r \approx 97$ fm

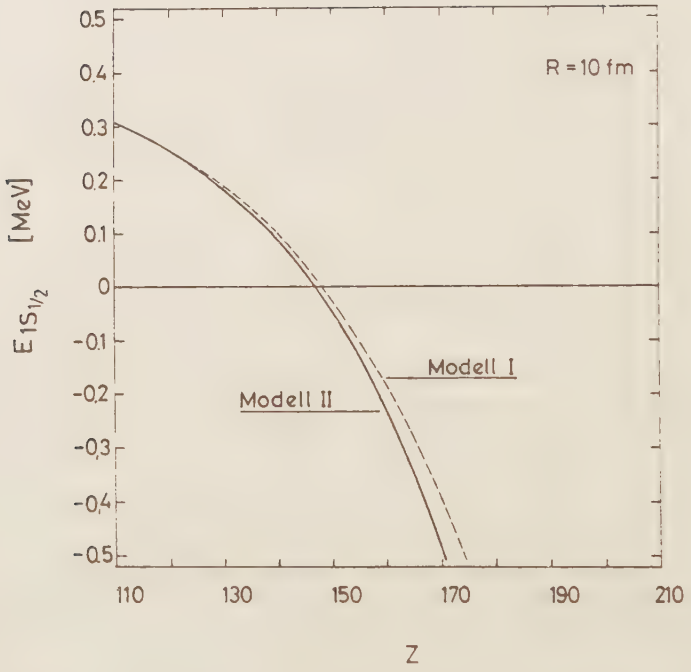


Abb. 6.1 Die Bindungsenergie des Elektrons ($E_{1s_{1/2}}=m-\varepsilon_b$) im Feld einer Kugelschale (Modell I) und einer homogen geladenen Kugel (Modell II) für verschiedene Kernladungszahlen (Z). Für beide Fälle ist R=10 fm.

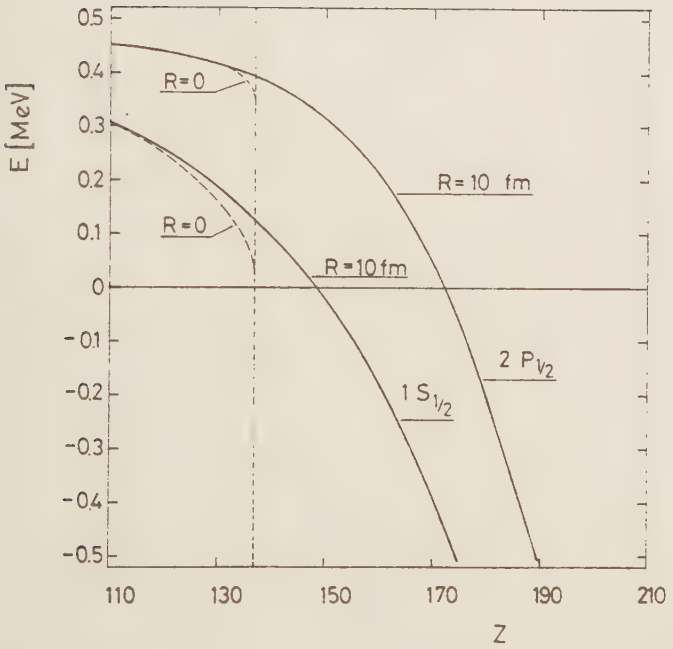


Abb. 6.2 Die $1S_{1/2}$- und $2P_{1/2}$-Energieeigenwerte des Elektrons als Funktion der Kernladungszahl Z im Feld eines punktförmigen Kerns (----) und einer Kugelschale mit dem Radius 10 fm (——).

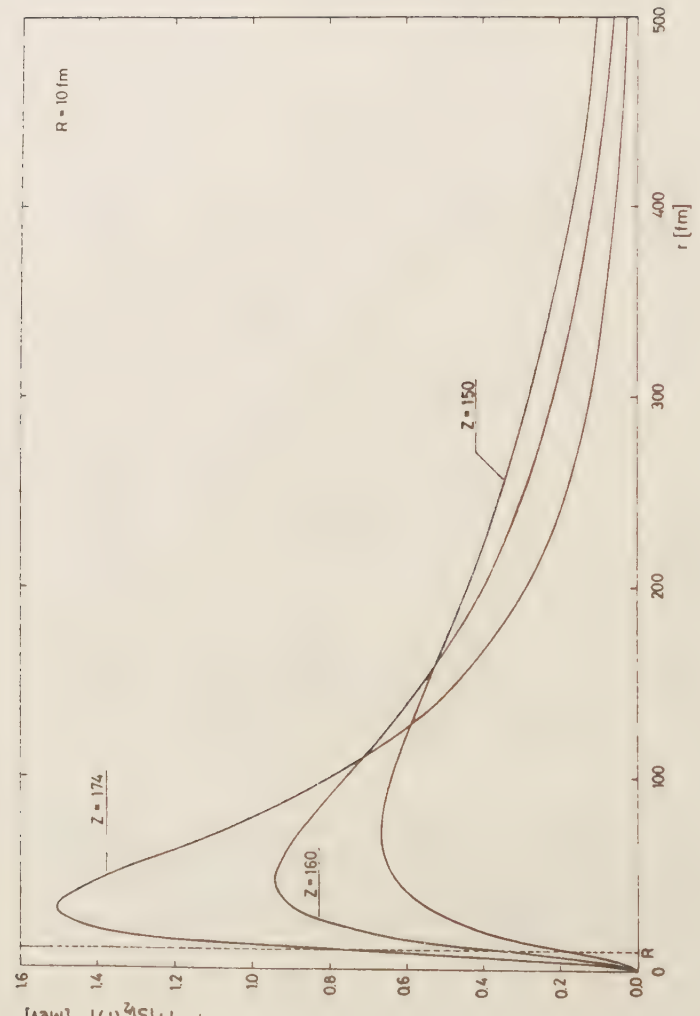


Abb. 6.3 Die Elektronenladungsdichte des $1S_{1/2}$-Zustandes als Funktion von r für verschiedene Kernladungszahlen (Z). Modell I wurde für den Kern mit dem Radius 10 fm genommen.

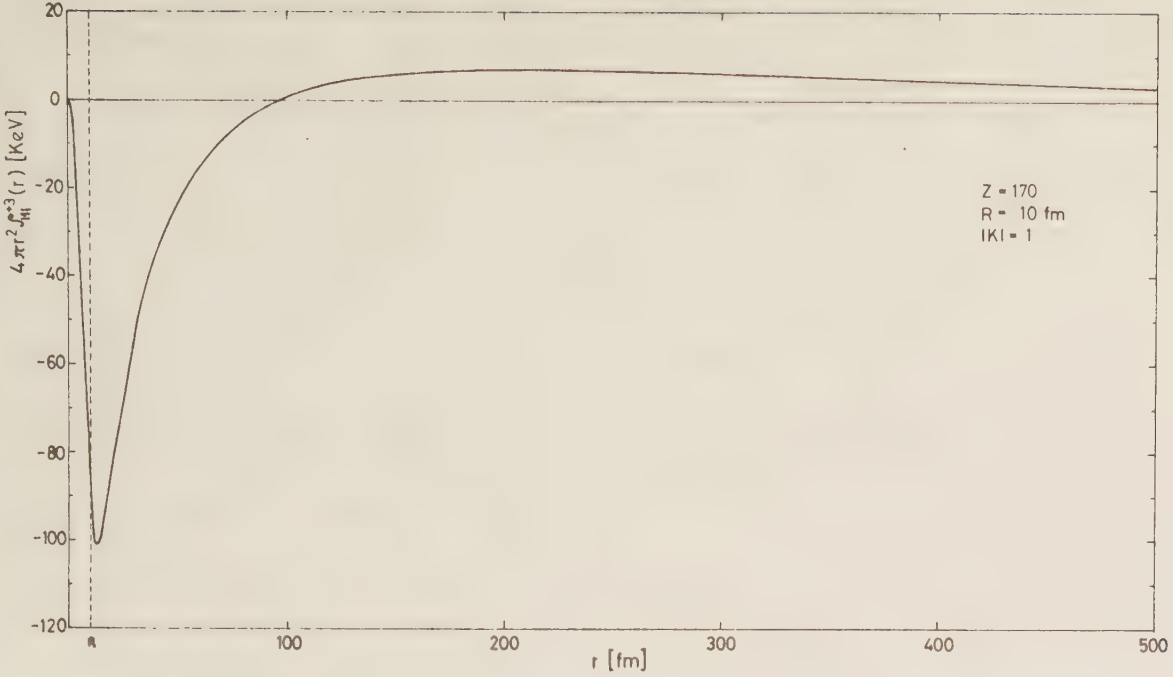


Abb. 6.4 Die induzierte Vakuum-Polarisationsladungsdichte der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^n$ $n \geq 3$ als Funktion von r für Z=170 und Modell I (R=10 fm).

in den positiven Bereich über. Ein Maßstab für die Genauigkeit meiner Resultate bezüglich ρ_{111}^{+3} und damit V^{+3} bzw. $\Delta E_{1S_{1/2}}^{V^{+3}}$ (siehe unten) ist der Wert von

$$Q^{+3} = 4\pi \int_0^\infty dr\, r^2\, \rho_{111}^{+3}(r)$$

Nach unserer Definition des Vakuums (für $Z < Z_c$ ungeladenes Vakuum siehe Abschnitt 4.1) und nach dem Erhaltungssatz für die elektrische Ladung erwartet man für Q^{+3} den Wert Null. Diese Werte sind in der Tabelle 6.2 angegeben.

Die Ergebnisse der ersten und der zweiten Zeile der Tabelle 6.1 stellen die Energie des $1S_{1/2}$-Niveaus für das Modell I dar. Die Resultate der ersten Zeile habe ich im Ortsraum anhand der Gleichung (5.1.4) berechnet, und die Werte der zweiten Zeile zeigen die Ergebnisse, die ich durch die Lösung der Dirac-Gleichung für $V=V^\circ$ im Impulsraum erhalten habe. Wie man sieht, sind sie in guter Übereinstimmung bei einem Fehler von ungefähr 1 in der 6. Stelle für Z=110 und etwa 2 in der 5. Stelle für Z=174. Die kleine Uneinigkeit für höhere Z liegt daran, daß man im Impulsraum für höhere Z ein großes K_{max} (siehe Abb. 5.1) und damit eine höhere Anzahl von Stützstellen braucht.

Die Werte der dritten Zeile stellen die Energieverschiebung aufgrund des Uehling-Potentials ($\Delta E_{1S_{1/2}}^{V_{UE}}$) für Modell I dar. Aus den Werten für $\Delta E_{1S_{1/2}}^{V_{UE}}$ und aus Abb. 6.5 erkennt man, daß das Uehling-Potential ein attraktives Potential ist, d.h. es bindet das Elektron mehr an den Kern, und dies hat eine Beschleunigung des Eintauchens des $1S_{1/2}$-Niveaus ins negative Kontinuum zur Folge. In der Abb. 6.6 wurden das Uehling-Potential und das Coulomb-Potential für verschiedene Modelle dargestellt. Daraus ist ersichtlich, daß das Uehling-Potential nur für kleine r eine Modifikation des Coulomb-Gesetzes bewirkt. Weiterhin kann man aus dem analytischen Ausdruck für das Uehling-Potential im Ortsraum[3] feststellen, daß es für r größer als die Compton-Wellenlänge des Elektrons $\lambda\!\!\!^{-}_e = \frac{1}{m} \simeq 386.159$ fm exponentiell abfällt. Dies bedeutet, daß ein Elektron mit einem Bohr'schen Radius (a_B) kleiner als $\lambda\!\!\!^{-}_e$ nicht das Coulomb-Potential des Kerns, sondern ein modifiziertes Coulomb-Potential $V=V^\circ + V_{UE}$ spurt. Dagegen empfindet ein Elektron mit $a_B \gg \lambda\!\!\!^{-}_e$ nur das Coulomb-Potential des Kerns. Aufgrund dessen sind die Energieverschiebungen für einen

Z	110	130.18422	153.48034	165.12840	170	173	174
$E_{1S_{1/2}}^{(\text{Ortsraum})}$ (Mev)	0.307195	0.184782	-0.07002	-0.28094	-0.39159	-0.46686	-0.49318
$E_{1S_{1/2}}^{(\text{Impulsraum})}$ (Mev)	0.307196	0.184786	-0.07002	-0.28092	-0.39157	-0.46684	-0.49316
$\Delta E_{1S_{1/2}}^{V_{UE}}$ (Mev)	-0.000259	-0.000851	-0.00346	-0.00635	-0.00793	-0.009	-0.00937
$\Delta E_{1S_{1/2}}^{V^{+3}}$ (Mev)	0.000015	0.000063	0.00031	0.00064	0.00087	0.00104	0.00111
Q^{+3}	$5.62\ 10^{-8}$	$8.22\ 10^{-8}$	$-7.05\ 10^{-8}$	$3.97\ 10^{-7}$	$-3.70\ 10^{-7}$	$7.68\ 10^{-7}$	$3.48\ 10^{-6}$

Tabelle 6.2 Die Grundzustandsenergie ($E_{1S_{1/2}}$) des Elektrons im Feld eines ausgedehnten Kerns (Modell I, R=10 fm) im Orts- und im Impulsraum. $\Delta E_{1S_{1/2}}^{V_{UE}}$ ist die zugehörige Energieverschiebung aufgrund des Uehling-Potentials V_{UE} und $\Delta E_{1S_{1/2}}^{V^{+3}}$ ist die zugehörige Energieverschiebung aufgrund des V^{+3}-Potentials. Q^{+3} zeigt die induzierte Ladungsdichte im ganzen Raum.

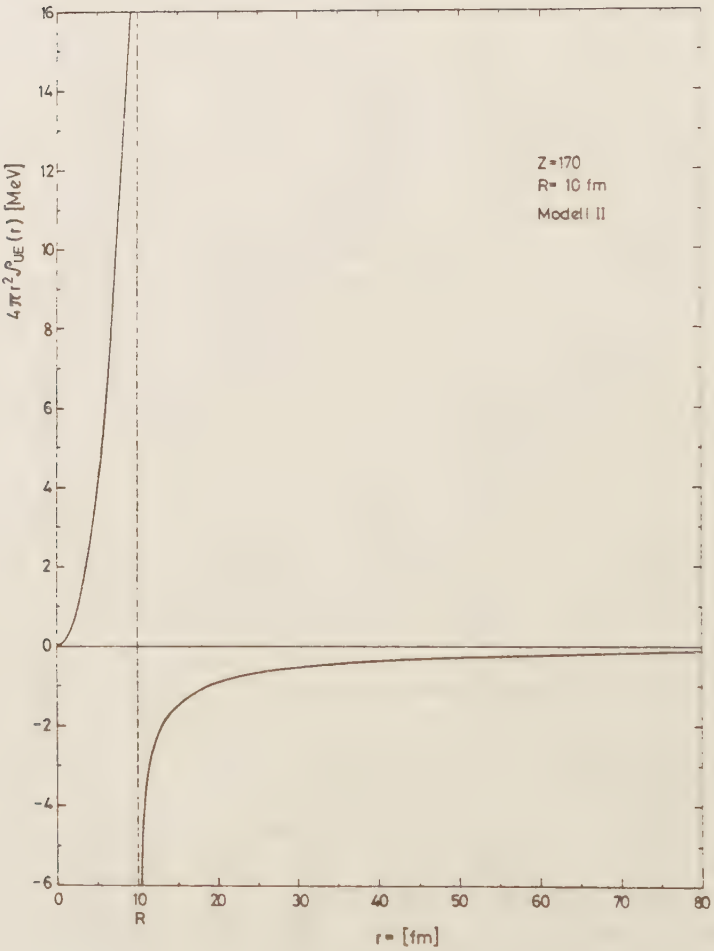


Abb. 6.5 Die induzierte Vakuum-Polarisationsdichte der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ als Funktion von r für Z=170 und Modell II (R=10 fm).

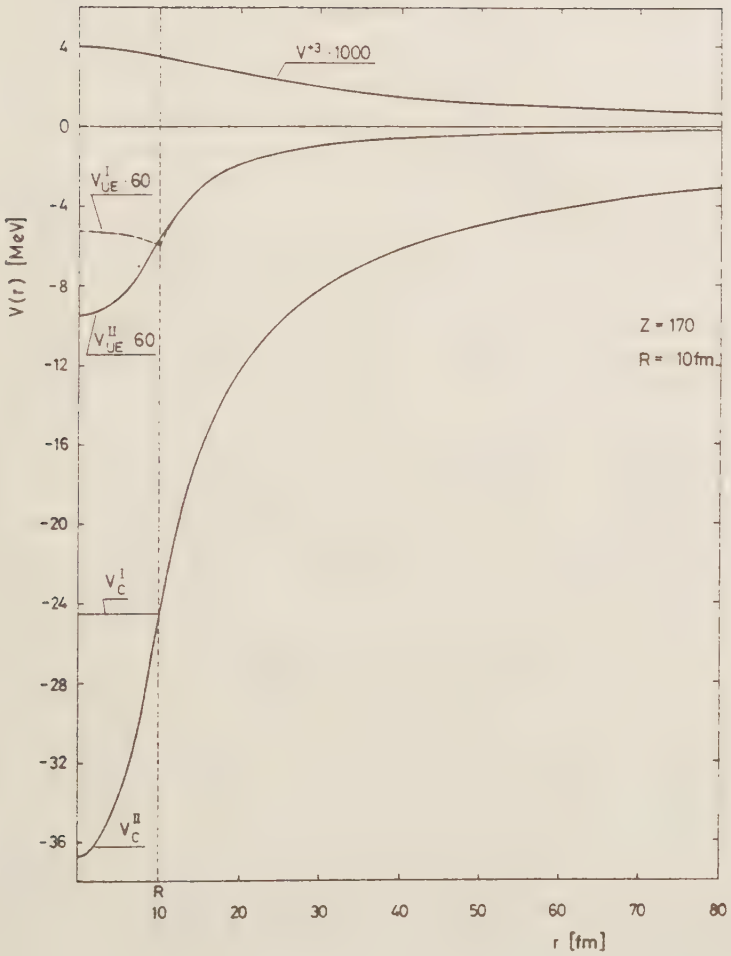


Abb. 6.6 Das Coulomb-Potential $V_C(r)$ und das Uehling-Potential $V_{UE}(r)$ als Funktion von r für verschiedene Kernmodelle (I und II). Das Vakuum-Polarisationspotential der Ordnung $\propto (Z\propto)^n$, $n \geq 3$ ($V^{+3}(r)$) ist nur für Modell I dargestellt. Der Kernradius R ist gleich 10 fm und die Kernladungszahl Z=170.

Kern mit Z=110 ($a_B \approx 481$ fm) geringer als für einen Kern mit Z=174 ($a_B \approx 304$ fm) (siehe Tabelle 6.2).
Die Energieverschiebungen aufgrund V^{+3} sind in der vierten Zeile angegeben. Wie man aus den Werten für $\Delta E^{V^{+3}}_{1S_{1/2}}$ und den Abb. 6.4 und 6.6 erkennt, ist V^{+3} ein repulsives Potential, d.h. es verringert die Bindung des Elektrons an den Kern. Da V^{+3} im Vergleic zum V_{UE} schwach ist, ist der Nettoeffekt des Vakuum-Polarisationspotentials $V_{VP} = V_{UE} + V^{+3}$ attraktiv. Es vergrößert die Bindungsenergie des Elektrons um 8.26 Kev bei Z=174 und um 0.244 Kev bei Z=110 (siehe Abb. 6.7). Aus der Extrapolation der Kurve für $\Delta E^{V^{+3}}_{1S_{1/2}}$ sieht man, daß diese Energieverschiebung auch bei $Z=Z_c$ endlich bleibt. Dies zeigt uns, daß die Reihe für V^{+3} auch für $Z=Z_c$ konvergiert. Im Rahmen meiner Genauigkeit (hier ± 1 in der 6. Stelle für Z=110 und ± 2 in der 5. Stelle für Z=174) stimmen meine Resultate für $\Delta E^{V^{+3}}_{1S_{1/2}}$ mit den Ergebnissen von Gyulassy[17] überein.
Die Rechnungen im Impulsraum stimmen also im allgemeinen mit den Rechnungen im Ortsraum überein. Damit werden die Aussagen von Greiner et al. und Popov bestätigt, daß das 1S -Niveau für eine bestimmte kritische Ladungszahl Z_c das negative Kontinuum erreicht und dort die Wellenfunktion lokalisiert bleibt. Ebenso reproduziere ich ihre Ergebnisse bezüglich der Vakuum-Polarisation in 1. Ordnung in $Z\alpha$ (Uehling-Potential). Diese Korrektur beschleunigt das Eintauchen geringfügig und bleibt bei $Z \to Z_c$ endlich.
Die Vakuum-Polarisation in beliebiger Ordnung in $Z\alpha$ ist ebenfalls im Einklang mit den Rechnungen von Guylassy[17]. Diese Übereinstimmung ist gegeben im Rahmen meiner Genauigkeit, nämlic ± 1 in der 6. Stelle für Z=110 und ± 2 in der 5. Stelle für Z=174. Dies ist ein wichtiger unabhängiger Test, da die Rechnungen in beiden Formulierungen sehr aufwendig sind und somit die erhaltenen Ergebnisse erhärtet sind.
Der Nettoeffekt des Vakuum-Polarisationspotentials ist attraktiv und endlich bei $Z \to Z_c$, und damit wird hier die Aussage von Panchapakesan[23] widerlegt.

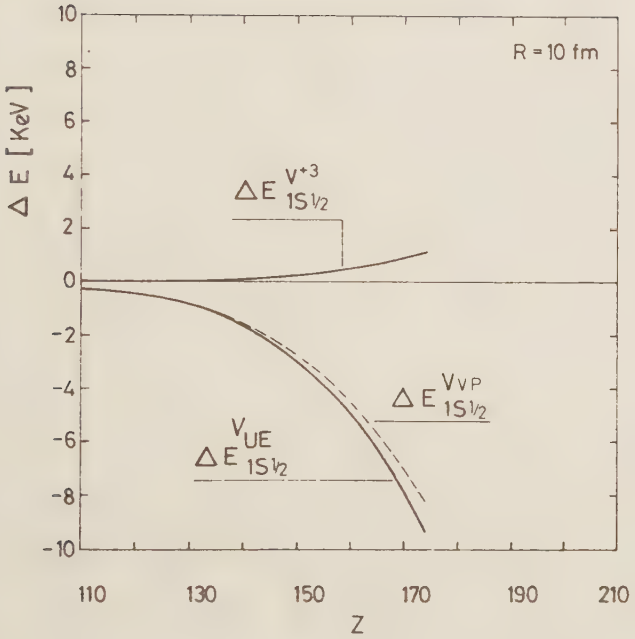
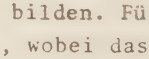
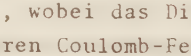


Abb. 6.7 Die Energieverschiebungen (aufgrund des Uehling Potentials ($\Delta E_{1S_{1/2}}^{V_{UE}}$), des V^{+3} ($\Delta E_{1S_{1/2}}^{V^{+3}}$) und des $V=V_{UE}+V^{+3}(\Delta E_{1S_{1/2}}^{V_{VP}})$ des Elektrons im Feld einer Kugelschale mit dem Radius 10 fm als Funktion der Kernladungszahl Z.

7. Zusammenfassung

Im Coulomb-Feld eines überschweren Kerns können die gebundenen Zustände eines Elektrons die Energie -m erreichen. Z.B. kann der $1S_{1/2}$-Zustand im Feld eines homogen geladenen Kerns der Ladungszahl $Z_c \approx 170$ die Energie -m haben, und bei Erhöhung von Z kann spontane Positronenemission auftreten. Für diese Behauptung gibt es zahlreiche Arbeiten von Autoren wie Popov und vor allem Greiner und Mitarbeiter[13]. Sie gehen dabei von der Dirac-Gleichung für ein Elektron im Coulomb-Potential eines Kerns der Ladung Z aus. Dies hat uns bewogen, dieses Problem im Rahmen der Quantenelktrodynamik (QED) zu untersuchen. In der QED läuft die Wechselwirkung zwischen einem Elektron und einem Kern über viele Prozesse. Diese sind durch die T-Matrix bzw. durch die entsprechenden Feynman-Diagramme gegeben. Dazu gehe ich zunächst von der Annahme aus, daß man den Kern als ein schweres Proton ansehen kann. Dann betrachte ich alle möglichen Feynman-Diagramme der Elektron-Proton-Streuung. Um die Feynman-Graphen bzw. die T-Matrix, die zur Streuung eines Elektrons mit einem Kern der Ladung Z und der Masse M gehören, zu erhalten, ersetze ich die Ladung des Protons e_p durch Ze_p und die Masse des Protons m_p durch M. Da mit Erhöhung der Protonenzahl der Kern immer schwerer wird, ist es sinnvoll, den Limes $M \to \infty$ zu bilden. Für diesen Limes erhalte ich $\lim_{M\to\infty}$ = , wobei das Diagramm die Streuung eines Elektrons im äußeren Coulomb-Feld der Ordnung $Z\alpha$ angibt. Außerdem stellte ich fest, daß $\lim_{M\to\infty}$  = und $\lim_{M\to\infty}$  = ist, was die Streuung eines Elektrons im äußeren Coulomb-Feld in 2. und 3. Ordnung in $Z\alpha$ angeben. Analog kann man zeigen, daß die Summe aller Diagramme, die keine Vakuum-Polarisation bzw. keine äußeren ausgetauschten Photonen enthalten, zur Coulomb-Streuung der Ordnung n führen. Ich konnte auch zeigen, daß die Summe $\lim_{M\to\infty}$ = 0 ist. Damit sind alle Diagramme, die diese Summe als Faktor enthalten, Null und ich erhalte die T-Matrix für die Streuung eines Elektrons im Coulomb-Potential. Dann lasse ich alle Terme der Ordnung $\alpha^m (Z\alpha)^n$ $(\alpha \approx \frac{1}{137}, m \geq 2, n \geq 1)$ weg, und erhalte die Bethe- Salpeter-Gleichung (3.1.25).

Die homogene Gleichung, zuständig für die Bildungszustände, läßt sich in die gesuchte verallgemeinerte Dirac-Gleichung umschreiben (3.1.34). Sie enthält neben dem Coulomb-Potential ein Potential, herrührend von der Vakuum-Polarisation (3.1.26c) und von der Selbstenergie (3.1.26d).
Anschließend habe ich nach einem genäherten Propagator gesucht, der aus der Bethe-Salpeter-Gleichung für die Elektron-Kern-Streuung im Limes $M\to\infty$ eine geschlossene Gleichung liefert, die die gewünschte T-Matrix (3.1.25) plus Korrektur der Ordnung $\frac{1}{M}, \frac{1}{M^2}$ ..... enthält. Dabei habe ich festgestellt, daß sowohl der Gross- als auch der Blankenbecler-Sugar-Propagator für Punktteilchen nicht verwendbar ist. Es wird allerdings möglich, wenn eine ausgedehnte Kernladungsverteilung angenommen wird. Es zeigt sich jedoch, daß die Anwendung von genäherten Propagatoren im Limes $M\to\infty$ zu keinen Vereinfachungen führt.
Eine von der Formulierung im Impulsraum nahegelegte Behandlung der Vakuum-Polarisation würde gemäß (4.1.2) über die Coulomb-off-shell t-Matrix (4.1.1) erfolgen: Vakuum-Polarisation , Selbstenergie . Für die numerische Behandlung dieser singulären Größe t konnte jedoch kein gangbarer Weg gefunden werden. Deswegen wurde das Vakuum-Polarisationspotential durch die Greensfunktionen im Ortsraum dargestellt. Auch dies erwies sich als technisch unerwartet schwierig, da die auftretenden speziellen Funktionen sich nicht einfach behandeln ließen (siehe Anhang E-F). Das Verfahren von Gyulassy war dabei eine wesentliche Stütze, erforderte jedoch eine Erweiterung und Modifikation, da die Potentiale im Impulsraum dargestellt wurden und nicht wie bei Gyulassy im Ortsraum. Dies machte die Untersuchungen so umfangreich, daß zusätzliche Fragen nach der Selbstenergie und dem grundsätzlichen "Eintauchproblem" in dieser Arbeit nicht mehr aufgenommen werden konnten.
Bei der Lösung der Dirac-Gleichung im Impulsraum stößt man auf die Schwierigkeit, daß der Kern des Integrals logarithmisch singulär ist und daß die Singularität außerdem noch vom äußeren Parameter abhängt. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, haben wir eine modifizierte Spline-Interpolation durchgeführt.

Die numerischen Ergebnisse lassen sich wie folgt zusammenfassen:

a) Die Energie-Niveaus eines Elektrons können für bestimmte kritische Ladungszahlen Z_c das negative Kontiuum erreichen (Abb. 6.1-2).

b) Der Wert von Z_c hängt von der Ladungsverteilung des Kerns ab. Für R=10 fm ergibt sich für einen homogen geladenen Kern $Z_c \approx 171$ und für eine homogen geladene Kugelschale $Z_c \approx 174.6$ (Abb. 6.1).

c) Die Ladungsdichte der Elektronendichte bleibt für $Z \to Z_c$ endlich (Lokalisierung der Wellenfunktion für $Z \to Z_c$) (Abb. 6.3), d.h. spontane e^+-Emission kann nur für $Z > Z_c$ stattfinden.

d) Der Hauptbeitrag der Vakuum-Polarisation kommt vom Uehling-Potential . Es ist ein attraktives Potential (Tabelle 6.1-2 und Abb. 6.5-6).

e) V^{+3} (die Summe aller Vakuum-Polarisationsgraphen der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^n, n \geq 3$ ist ein repulsives Potential (Tabelle 6.2, Abb. 6.4 und 6.6).

f) Der Nettoeffekt der Vakuum-Polarisation beschleuigt das Eintauchen geringfügig, und er bleibt bei $Z \to Z_c$ endlich (Abb. 6.7).

Damit werden die Aussagen von Greiner et al. und Popov[13] bezüglich der niedrigsten Ordnung in der Vakuum-Polarisation bestätigt. Dagegen scheint die Behauptung von Panchapakesan[23], daß die Vakuum-Polarisation bei $Z \to Z_c$ das Eintauchen verhindert nicht richtig zu sein. Insbesondere wurde durch unsere unabhängigen Rechnungen der repulsive kleine Beitrag der Vakuum-Polarisation, beliebig hoher Ordnung über $(Z\alpha)$ hinausgehend, von Gyulassy bestätigt. Dieses neue Verfahren eröffnet nun den Weg für weitere Untersuchungen, etwa zur Selbstenergie. Mit geringen Modifikationen kann man das Verfahren auch für müonische Atome, wo die Vakuum-Polarisation eine wichtige Rolle spielt, verwenden. Grundsätzlich ist ein Anfang gemacht für die numerische Behandlung quantenelektrodynamischer Integralgleichungen direkt im Impulsraum und ohne Störungs-

theorie. Damit eröffnet sich auch die Möglichkeit einer Behandlung der nichtlinearen Effekte in der Vakuum-Polarisation und der Selbstenergie, wie sie in Kapitel 3 angedeutet wurde.

Anhang A Notation

Ich verwende in dieser Arbeit folgende Konventionen für die γ -Matrizen[1]:

$$\gamma p = \gamma_\mu p^\mu = \gamma^\mu p_\mu = \gamma^0 p_0 - \vec{\gamma}\cdot\vec{p} \tag{A.1}$$

$$\gamma_0 = \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{A.2}$$

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{A.3}$$

Für die Dirac-Spinoren benutze ich die folgenden Darstellungen:

$$u_\lambda(\vec{p}) = \sqrt{\frac{E_p + M}{2M}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p + M} \end{pmatrix} |\lambda\rangle, \qquad v_\lambda(\vec{p}) = \sqrt{\frac{E_p + M}{2M}} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p + M} \\ 1 \end{pmatrix} |\lambda\rangle, \tag{A.4}$$

$$\bar{u} = u^+ \gamma^0, \quad \bar{v} = v^+ \gamma^0, \tag{A.5}$$

wobei $E_p = \sqrt{\vec{p}^2 + M^2}$ ist und $|\lambda\rangle$ die Helizitätsspinoren darstellt. Daraus ergeben sich die Renormierungsbedingungen:

$$\bar{u}_\lambda(\vec{p})\, u_\lambda(\vec{p}) = 1 \tag{A.6}$$

$$\bar{v}_\lambda(\vec{p})\, v_\lambda(\vec{p}) = -1 \tag{A.7}$$

Die Energieprojektionsoperatoren sind gegeben durch:

$$\Lambda_{(+)}(\vec{p}) \equiv \sum_\lambda u_\lambda(\vec{p})\, \bar{u}_\lambda(\vec{p}) = \sum_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| \, \frac{E_p + M}{2M}$$

$$\times \begin{pmatrix} 1 & \frac{-\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p + M} \\ \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p + M} & \frac{-(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2}{(E_p + M)^2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2M}\left(M\cdot\mathbb{1} + E_p\cdot\gamma_0 - \vec{\gamma}\cdot\vec{p}\right)$$

$$= \frac{1}{2M}(\gamma p + M)\Big|_{p_0 = E_p}, \tag{A.8}$$

$$\Lambda_{(-)}(\vec{p}) \equiv \sum_\lambda v_\lambda(\vec{p})\, \bar{v}_\lambda(\vec{p}) = \frac{1}{2M}(M - \gamma p)\Big|_{p_0 = +E_p} \tag{A.9}$$

Im Falle $k_0 \neq E_k$ (off-shell) kann man schreiben

$$\frac{1}{2M}(\gamma k + M) = \frac{1}{2M}\left(\frac{E_k + k_0}{2E_k} + \frac{E_k - k_0}{2E_k}\right)(\gamma_0 k_0 - \vec{\gamma}\vec{k} + M)$$

$$= \frac{1}{2M}\,\frac{E_k + k_0}{2E_k}\,(\gamma_0 E_k + \gamma_0 (k_0 - E_k) - \vec{\gamma}\vec{k} + M)$$

$$+ \frac{1}{2M}\,\frac{E_k - k_0}{2E_k}\,(-\gamma_0 E_k + \gamma_0 (k_0 + E_k) - \vec{\gamma}\vec{k} + M)$$

$$= \frac{E_k + k_0}{2E_k}\left[\frac{1}{2M}(\gamma k + M)\Big|_{k_0 = E_k}\right] + \frac{E_k - k_0}{2E_k}\left[\frac{1}{2M}(\gamma k + M)\Big|_{k_0 = -E_k}\right]$$

$$+ \frac{1}{2M}\,\frac{1}{2E_k}\left[(E_k + k_0)\gamma_0 (k_0 - E_k) + (E_k - k_0)\gamma_0 (k_0 + E_k)\right]$$

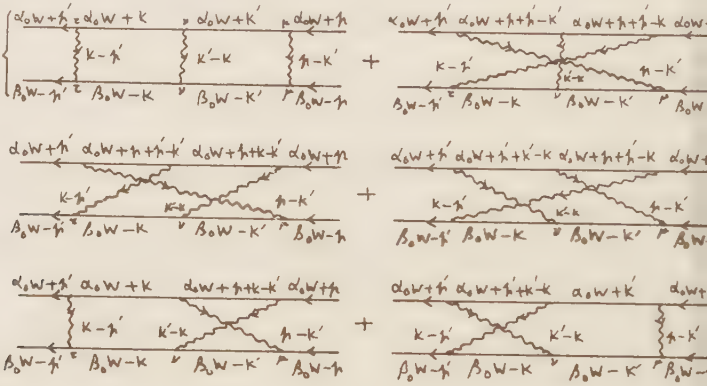
$$= \frac{E_k + k_0}{2E_k}\left[\frac{1}{2M}(\gamma k + M)\Big|_{k_0 = E_k}\right] + \frac{E_k - k_0}{2E_k}\left[\frac{1}{2M}(\gamma k + M)\Big|_{k_0 = -E_k}\right]$$

$$= \frac{E_k + k_0}{2E_k}\,\Lambda_{(+)}(\vec{k}) + \frac{E_k - k_0}{2E_k}\,\Lambda_{(-)}(-\vec{k}) \qquad \text{(A.10)}$$

Anhang B Der Limes $M \longrightarrow \infty$

B.1 Der Grenzwert $M \longrightarrow \infty$ der Diagramme der Ordnung $(Z\alpha)^3$

Hier will ich für $M \longrightarrow \infty$ die Summe der folgenden Diagramme berechnen

$I_2 = \lim_{M\to\infty}$ 

(B.1.1)

Unter Verwendung der Relationen (3.1.2a-4) erhalte ich :

$$I_2 = \frac{(iZe)^3}{(2\pi)^3}\,\delta^{\mu_0}\delta^{\nu_0}\delta^{\varepsilon_0}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4}\Big\{\Big[\frac{\lambda}{(k_0-\eta_0+i\varepsilon)}\,\frac{\lambda}{(k'_0-\eta_0+i\varepsilon)}$$

$$+\frac{\lambda}{(\eta_0-k'_0+i\varepsilon)}\,\frac{\lambda}{(\eta_0-k_0+i\varepsilon)}+\frac{\lambda}{(\eta_0-k'_0+i\varepsilon)}\,\frac{\lambda}{(k_0-k'_0+i\varepsilon)}$$

$$+\frac{\lambda}{(k'_0-k_0+i\varepsilon)}\,\frac{\lambda}{(\eta_0-k_0+i\varepsilon)}+\frac{\lambda}{(k_0-\eta_0+i\varepsilon)}\,\frac{\lambda}{(k_0-k'_0+i\varepsilon)}$$

$$+\frac{\lambda}{(k'_0-k_0+i\varepsilon)}\,\frac{\lambda}{(k'_0-\eta_0+i\varepsilon)}\Big]^{(k)}\,\frac{-\lambda}{(k-\eta')^2+i\varepsilon}\,\frac{-\lambda}{(k'-k)^2+i\varepsilon}\,\frac{-\lambda}{(\eta-k')^2+i\varepsilon}$$

$$\times\;\frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_\eta\cdot e_{\eta'}}}\;\Big[\bar{u}(-\vec{\eta}')\,(-ie\gamma_\varepsilon)\,iS_F(\beta_0W-k)$$

$$\times\;(-ie\gamma_\nu)\,iS_F(\beta_0W-k')\,(-ie\gamma_\mu)\,u(-\vec{\eta})\Big]^{(e)}\Big\} \qquad (B.1.2)$$

Nach der Vereinfachung ergibt sich für die erste eckige Klammer

$$\Big[\frac{\lambda}{(k_0-\eta_0+i\varepsilon)}\,\frac{\lambda}{(k'_0-\eta_0+i\varepsilon)}+\text{----------}\Big]^{(k)}=(2\pi)^2\,\delta(\eta_0-k'_0)\,\delta(k'_0-k_0)$$

(B.1.3)

Durch Einsetzen von (B.1.3) in (B.1.2) erhalte ich

$$I_2 = \frac{(iZe)^3}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{(2\pi)^3}\,\sqrt{\frac{m^2}{e_{\vec{n}}\cdot e_{\vec{n}'}}}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\int\frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3}\,\frac{i}{(\vec{k}-\vec{n}')^2-i\varepsilon}\,\frac{i}{(\vec{k}-\vec{k}')^2-i\varepsilon}$$

$$\times\frac{i}{(n-k')^2-i\varepsilon}\Big[\bar{u}(-\vec{n}')(-ie\gamma^0)\,iS_F(\beta_0 W-k)(-ie\gamma^0)\,iS_F(\beta_0 W-k')$$

$$\times(-ie\gamma^0)\,u(-\vec{n})\Big]^{(e)}\Big|_{n_0=n_0'=k_0=k_0'}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_{\vec{n}}\cdot e_{\vec{n}'}}}\;\bar{u}^{(e)}(\vec{P})\Big\{\int d\vec{k}\int d\vec{k}'\,V_1^0(\vec{P}',\vec{k})\,iS_F(\vec{k},P_0)$$

$$V_1^0(\vec{k},\vec{k}')\,iS_F(\vec{k}',P_0)\,V_1^0(\vec{k}',\vec{P})\Big\}\,u^{(e)}(\vec{P})\Big|_{P_0=P_0'=K_0=K_0'}$$

$\equiv$

, (B.1.4)

$k=\beta_0 W-k,\ k'=\beta_0 W-k',\ P=\beta_0 W-n,\ P'=\beta_0 W-n',\ V_1^0(\vec{P},\vec{k})=\dfrac{i(Ze)^2\gamma^0}{(2\pi)^3(\vec{P}-\vec{k})^2}$.

Analog zu Abschnitt 3.1 kann ich (B.1.4) in der Form :

$$I_2 = \frac{1}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{m^2}{e_{\vec{n}}\cdot e_{\vec{n}'}}}\;\bar{u}^{(e)}(\vec{P}')\Big\{\int d^4k\int d^4k'\;V^0(q_1)\,iS_F(K)$$

$$V^0(q_2)\,iS_F(K')\,V^0(q_3)\Big\}\,u^{(e)}(\vec{P}),\quad\text{(B.1.5)}$$

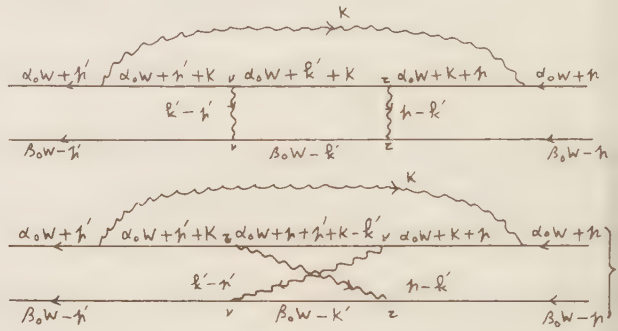
$$V^0(q) = \frac{-iZe^2\gamma^0\delta(q_0)}{(2\pi)^3\cdot q^2},\quad q_1=P'-k,\ q_2=k-k',\ q_3=K'-P.$$

schreiben, wobei ich an jeden Vertex eine die Energie erhaltende δ -Funktion eingeführt habe.

B.2 Der Grenzwert $M \longrightarrow \infty$ der Diagramme der Ordnung Z $(Z\alpha)^3$

Ich möchte hier zeigen, daß

$I_3 \equiv \lim_{M\to\infty}$



gleich Null ist. Dazu schreibe ich:

$$I_3 = \lim_{M\to\infty} \beta(-ze^2) \int d^4k' \left\{ \left[\bar{u}(\vec{\hbar}) \left(I_{D_1}^{\nu z}(\hbar,\hbar',k') + I_{D_2}^{z\nu}(\hbar,\hbar',k') \right) u(\vec{\hbar}) \right] \right.$$

$$\left. \times\, I^{rest}(\hbar,\hbar',k') \right\}, \qquad \text{(B.2.1)}$$

$$\beta(-ze^2) \equiv \frac{i(-ie)^2(ize)^4}{(2\pi)^8} \frac{1}{(2\pi)^6} \sqrt{\frac{M^2\cdot m^2}{(E_{\hbar}E_{\hbar'})(e_{\hbar}\cdot e_{\hbar'})}} \underset{M\to\infty}{\approx} \frac{i(-ie)^2(ize)^4}{(2\pi)^{14}} \sqrt{\frac{M^2}{e_{\hbar}}}$$

$$I^{rest}(\hbar,\hbar',k') \equiv \frac{1}{(k'-\hbar')^2+i\varepsilon} \quad \frac{1}{(\hbar-k')^2+i\varepsilon} \left[u(-\vec{\hbar}) \left(\gamma_\nu \frac{\gamma(\beta_0 W-k')+m}{(\beta_0 W-k')^2-m^2+i\varepsilon} \gamma_z \right) u(\vec{\hbar}) \right.$$

(B.2.2)

$$I_{D_1}^{\nu z}(\hbar,\hbar',k') \equiv \int d^4k\, \gamma^\mu S_F(\alpha_0 W+\hbar'+k)\gamma^\nu S_F(\alpha_0 W+k'+K)\gamma^z$$

$$\times\, S_F(\alpha_0 W+k+\hbar)\gamma_\mu \quad \frac{1}{k^2-\lambda^2+i\varepsilon}, \qquad \text{(B.2.3a)}$$

$$I_{D_2}^{\nu z}(\hbar,\hbar',k') \equiv \int d^4k\, \gamma^\mu S_F(\alpha_0 W+\hbar'+k)\gamma^z S_F(\alpha_0 W+\hbar+\hbar'+k-k')\gamma^\nu$$

$$\times\, S_F(\alpha_0 W+k+\hbar)\gamma_\mu \quad \frac{1}{k^2-\lambda^2+i\varepsilon}. \qquad \text{(B.2.3b)}$$

λ ist eine kleine Photonenmasse, die eingeführt wurde, um die auftretenden Infrarot-Divergenzen zu umgehen. Zunächst berechne ich $I_{D_1}^{\nu z}(\hbar,\hbar',k')$ unter Berücksichtigung von $M \longrightarrow \infty$. Dazu

definiere ich: $P' = \alpha_0 w + \mathfrak{h}'$, $K' = \alpha_0 w + \mathfrak{k}'$ und $P = \delta_0 w + \mathfrak{p}$ und benutze die Feynman-Identität:

$$\frac{1}{a_1 a_2 \cdots a_n} = (n-1)! \int_0^1 dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \cdots \int_0^{x_{n-2}} dx_{n-1} \; \frac{1}{[a_n x_{n-1} + a_{n-1}(x_{n-2} - x_{n-1}) + \cdots + a_1 (1 - x_1)]^n}$$

Damit wird (B.2.4)

$$I^{\mu\nu}_{D_1}(P,P',K') = 3! \int_0^1 dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \int_0^{x_2} dx_3 \int d^4k \; \frac{Z(P,P',K,K')}{N(P,P',K,K')} \quad \text{(B.2.5)}$$

mit

$$Z(P,P',K,K') = \gamma_\mu (\not{p}' + \not{k} + M) \gamma^\nu (\not{k}' + \not{k} + M) \gamma^\tau (\not{p} + \not{k} + M) \gamma^\mu, \quad \text{(B.2.6)}$$

$$N(P,P',K,K') = \Big\{ k^2 + 2k \left[x_3 (p' - k') + x_2 (k' - p) + p x_1 \right] + (k'^2 - M^2)(x_2 - x_3) + \lambda^2 x_1 - \lambda^2 + i\varepsilon \Big\}^4, \quad \text{(B.2.7)}$$

$$\not{k} = \gamma \cdot k \,, \quad \not{p} = \gamma \cdot p, \ldots\ldots\ldots\ldots$$

Nun führe ich die Transformation $k = t - [x_3 (p' - k') + x_2 (k' - p) + x_1 p] \equiv k - c_1$ durch: $\int d^4k \to \int d^4t$ und es gilt

$$N(P,P',t,K') = (t^2 - L + i\varepsilon)^4, \quad \text{(B.2.8)}$$

mit

$$L = c_1^2 - (k'^2 - M^2)(x_2 - x_3) - \lambda^2 x_1 + \lambda^2, \quad \text{(B.2.9)}$$

$$Z(P,P',t,K') = \gamma_\mu (z_1 + \not{t}) \gamma^\nu (z_2 + \not{t}) \gamma^\tau (z_3 + \not{t}) \gamma^\mu, \quad \text{(B.2.10)}$$

mit

$$z_1 \equiv \not{p}' + M - \not{c}_1 = M[\gamma^0 (1 - x_1) + 1] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{M}\right) \approx M[\gamma^0 (1 - x_1) + 1] \quad \text{(B.2.11)}$$

$$z_2 \equiv \not{k}' + M - \not{c}_1 = M[\gamma^0 (1 - x_1) + 1] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{M}\right) \approx M[\gamma^0 (1 - x_1) + 1] \quad \text{(B.2.12)}$$

$$z_3 \equiv \not{p} + M - \not{c}_1 = M[\gamma^0 (1 - x_1) + 1] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{M}\right) \approx M[\gamma^0 (1 - x_1) + 1]. \quad \text{(B.2.13)}$$

Anhand der Standard-Integrale:

$$\int d^4t \; \frac{1}{(t^2-L+i\varepsilon)^4} = \frac{i\pi^2}{3!\,(L-i\varepsilon)^2}\,, \quad \int d^4t \; \frac{t_\alpha t_\beta}{(t^2-L+i\varepsilon)^4} = \frac{g_{\alpha\beta}}{4}\,\frac{(-i\pi^2)}{3(L-i\varepsilon)} \tag{B.2.14}$$

und

$$\int d^4t \; \frac{t_\alpha}{(t^2-L+i\varepsilon)^4} = 0 = \int d^4t \; \frac{t_\alpha t_\beta t_\gamma}{(t^2-L+i\varepsilon)^4} \tag{B.2.15}$$

kann ich die t-Integration durchführen . Man erhält:

$$I_{D_1}^{\nu\tau}(P,P',k') \underset{M\to\infty}{=} I_1^{\nu\tau} + I_2^{\nu\tau} \tag{B.2.16}$$

mit

$$I_1^{\nu\tau} \equiv 3!\,\left(\frac{-i\pi^2}{3}\right)\frac{g_{\alpha\beta}}{4}\int_0^1 dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \int_0^{x_2} dx_3 \; M\left\{\frac{\gamma_\mu\gamma^\alpha\gamma^\nu\gamma^\beta\gamma^\tau}{(L-i\varepsilon)}\right.$$

$$\times\left[\gamma^\circ(1-x_1)+1\right]\gamma^\mu + \frac{\gamma_\mu\gamma^\alpha\gamma^\nu\left[\gamma^\circ(1-x_1)+1\right]\gamma^\beta\gamma^\mu}{(L-i\varepsilon)}$$

$$\left. + \frac{\gamma_\mu\left[\gamma^\circ(1-x_1)+1\right]\gamma^\nu\gamma^\alpha\gamma^\tau\gamma^\beta\gamma^\mu}{(L-i\varepsilon)}\right\} \tag{B.2.17}$$

und

$$I_2^{\nu\tau} \equiv 3!\,\left(\frac{i\pi^2}{3!}\right)\int_0^1 dx_1\int_0^{x_1} dx_2\int_0^{x_2} dx_3 \; M^3\left\{\frac{\gamma_\mu\left[\gamma^\circ(1-x_1)+1\right]\gamma^\nu\left[\gamma^\circ(1-x_1)+1\right]}{(L-i\varepsilon)^2}\right.$$

$$\left.\times\gamma^\tau\left[\gamma^\circ(1-x_1)+1\right]\gamma^\mu\right\}. \tag{B.2.18}$$

Nun führe ich folgende Transformationen durch:

$$x_3 = x_2 z \;,\; x_2 = x_1 y \tag{B.1.19}$$

Damit ist

$$L = a x_1^2 - b x_1 + \lambda^2 \tag{B.2.20}$$

$$a \approx M^2 \;,\; b = \lambda^2 + y(1-z)c \;,\; c = (k'^2 - M^2) \tag{B.2.21}$$

Dabei habe ich die führenden Terme in M mitgenommen. Mit dieser neuen Transformation kann man für $I_1^{\nu\tau}$ schreiben:

$$I_1^{\nu\tau} \underset{M\to\infty}{=} \frac{g_{\alpha\beta}}{4}(-i\pi^2)\left[\gamma_\mu\gamma^\alpha\gamma^\nu\gamma^\beta\gamma^\tau I_\circ\gamma^\mu + \gamma_\mu\gamma^\alpha\gamma^\nu I_\circ\gamma^\beta\gamma^\mu\right.$$

$$\left. + \gamma_\mu I_\circ\gamma^\nu\gamma^\alpha\gamma^\beta\gamma^\mu\right] \tag{B.2.22}$$

mit

$$I_0 = \int_0^1 dx_1 \int_0^1 dy \int_0^1 dz \; x_1^2 \, y \, \frac{M[\gamma^0(1-x_1)+1]}{[M^2x_1^2 - bx_1 + \lambda^2 - i\varepsilon]}$$

$$= \int_0^\delta dx_1 \int_0^1 dy \, y \int_0^1 dz \; \frac{M x_1^2 [\gamma^0(1-x_1)+1]}{[M^2x_1^2 - bx_1 + \lambda^2 - i\varepsilon]}$$

$$+ \int_\delta^1 dx_1 \int_0^1 dy \, y \int_0^1 dz \; \frac{M x_1^2 [\gamma^0(1-x_1)+1]}{[M^2x_1^2 - bx_1 + \lambda^2 - i\varepsilon]}, \qquad \text{(B.2.23)}$$

$$\delta = \sqrt{\frac{m}{M}} \ll 1 .$$

Da beim zweiten Term der Gleichung (B.2.23) $x_1 \neq 0$ ist, kann ich näherungsweise für dessen Nenner schreiben: $M^2x_1^2$. Nun läßt sich die Integration über x_1 leicht durchführen und man sieht, daß der zweite Term für $M \longrightarrow \infty$ mindestens wie $\frac{1}{M^{3/2}}$ nach Null geht. Damit gilt:

$$I_0 \underset{M\to\infty}{=} \int_0^\delta dx_1 \int_0^1 dy \, y \int_0^1 dz \; \frac{M x_1^2 [\gamma^0(1-x_1)+1]}{[M^2x_1^2 - bx_1 + \lambda^2 - i\varepsilon]}$$

$$\underset{M\to\infty}{\simeq} \int_0^\delta dx_1 \int_0^1 dy \, y \int_0^1 dz \; \frac{M x_1^2 (\gamma^0+1)}{[M^2x_1^2 - bx_1 + \lambda^2 - i\varepsilon]} \qquad \text{(B.2.24)}$$

In der Gleichung (B.2.24) kann man die X_1-Integration leicht durchführen und man erkennt, daß für $M \longrightarrow \infty$ I_0 mindestens wie $\frac{1}{(M)^{3/2}}$ abfällt, d.h.

$$I_0 \xrightarrow{M\to\infty} 0 \qquad \text{(B.2.25)}$$

Damit gilt:

$$I_{D_1}^{\nu\tau}(P,P',K') \underset{M\to\infty}{=} I_2^{\nu\tau} \qquad \text{(B.2.26)}$$

Analog zerlege ich in $I_2^{\nu\tau}$ das Integral über X_1 in zwei Intervalle, nämlich $(0,\delta)$ und $(\delta,1)$. Hier fällt wiederum der Term, der das Integral $\int_\delta^1 dx_1$ enthält, für $M \longrightarrow \infty$ mindestens wie $\frac{1}{M}$ ab. Schließlich bekommt man

$$I_{D_1}^{\nu\tau}(P,P',K') \underset{M\to\infty}{=} I_2^{\nu\tau} = \left\{ \gamma_\mu (\gamma^0+1)\gamma^\nu(\gamma^0+1)\gamma^\tau(\gamma^0+1)\gamma^\mu \right\} I_R , \qquad \text{(B.2.27)}$$

$$I_R = M^3 \int_0^\delta dx_1 \int_c^1 dy\, y \int_0^1 dz \quad \frac{x_1^2}{[M^2 x_1^2 - b x_1 + \lambda^2 - i\varepsilon]^2} \qquad \text{(B.2.28)}$$

Hier integriere ich zunächst über z, dann über y und danach über x_1:

$$I_R \underset{M\to\infty}{=} -\frac{M}{c}\left\{ \frac{x^{(1)} \ln(-x^{(1)}) - x^{(2)} \ln(-x^{(1)})}{(x^{(2)} - x^{(1)})} - 1 - \frac{M^2}{c}\left[x^{(1)} \ln(-x^{(1)}) \right.\right.$$

$$\left.\left. + x^{(2)} \ln(-x^{(2)}) - \dot{x}^{(1)} \ln(-\dot{x}^{(1)}) - \dot{x}^{(2)} \ln(-\dot{x}^{(2)}) \right] \right\}, \qquad \text{(B.2.29)}$$

$$x^{(1)} = \frac{\lambda^2}{2a} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda^4}{a^2} - \frac{4(\lambda^2 - i\varepsilon)}{a}}\,, \quad \dot{x}^{(1)} = \frac{\lambda^2 + c}{2a} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{(\lambda^2+c)^2}{a^2} - \frac{4(\lambda^2 - i\varepsilon)}{a}} \qquad \text{(B.2.30)}$$

$$x^{(2)} = \frac{\lambda^2}{2a} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda^4}{a^2} - \frac{4(\lambda^2 - i\varepsilon)}{a}}\,, \quad \dot{x}^{(2)} = \frac{\lambda^2 + c}{2a} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{(\lambda^2+c)^2}{a^2} - \frac{4(\lambda^2 - i\varepsilon)}{a}} \qquad \text{(B.2.31)}$$

wegen $\bar{u}^{(k)}(\vec{p}\,')\,\gamma^\mu\, u^{(k)}(\vec{p}) \underset{M\to\infty}{=} \delta^{\mu 0}$ und den Gleichungen (B.2.27-31) folgt:

$$\bar{u}^{(k)}(\vec{p}\,')\, I_{D_1}^{\nu\tau}(P,P',K')\, u^{(k)}(\vec{p}) \underset{M\to\infty}{=} 8(i\pi^2)\,\delta^{\nu 0}\delta^{\tau 0}\left(-\frac{M}{c}\right)$$

$$\times\left\{\left[\frac{\lambda^2}{2\sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}} + \frac{\sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{2c}\right]\right.$$

$$\times \ln\left(\frac{-\lambda^2 + \sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{-\lambda^2 - \sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}\right) - 1\quad \frac{\sqrt{(\lambda^2+c)^2 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{2c}$$

$$\left.\times \ln\left(\frac{-(\lambda^2+c) + \sqrt{(\lambda^2+c)^2 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{-(\lambda^2+c) - \sqrt{(\lambda^2+c)^2 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}\right)\right\} \qquad \text{(B.2.32)}$$

Analog erhält man:

$$\bar{u}^{(k)}(\vec{p}\,')\, I_{D_2}^{\tau\nu}(P,P',K')\, u^{(k)}(\vec{p}) \underset{M\to\infty}{=} 8(i\pi^2)\,\delta^{\nu 0}\delta^{\tau 0}\left(-\frac{M}{c'}\right)$$

$$\times\left\{\left[\frac{\lambda^2}{2\sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}} + \frac{\sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{2c'}\right]\times\right.$$

$$\times \ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right)-1-\frac{\sqrt{(\lambda^2+c')^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{2c'}$$

$$\times \ln\left(\frac{-(\lambda^2+c')+\sqrt{(\lambda^2+c')^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-(\lambda^2+c')-\sqrt{(\lambda^2+c')^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right)\Bigg\}, \qquad (\ldots.33)$$

$$c' = [(P+p'-k')^2-M^2]. \qquad (B.2.34)$$

Nun schreibe ich für C und C′ :

$$c = k'^2-M^2 = [(\alpha_0 w+k'_0)^2-E^2_{k'}] = [(\alpha_0 w+k'_0)-E_{k'}][(\alpha_0 w+k'_0)+E_{k'}]$$

$$\cong 2M\left[(k'_0-\eta'_0)+\frac{\vec{\eta}'^2-\vec{k}'^2}{2M}\right] \equiv 2M(x+s) \qquad (B.2.35)$$

$$c' = [(P+p'-K')^2-M^2] = [(\alpha_0 w+\eta_0+\eta'_0-k'_0)^2-E^2_{\eta+\eta'-k'}]$$

$$\cong 2M\left[-(k'_0-\eta'_0)+\frac{\vec{\eta}'^2-(\vec{\eta}+\vec{\eta}'-\vec{k}')^2}{2M}\right] \equiv 2M(-x+s') \qquad (B.2.36)$$

mit $x = k'_0-\eta'_0$, $s=\frac{\vec{\eta}'^2-\vec{k}'^2}{2M}$, $s' = \frac{\vec{\eta}'^2-(\vec{\eta}+\vec{\eta}'-\vec{k}')^2}{2M}$.

Für die weitere Untersuchung mache ich Fallunterscheidungen:

1. $x \neq 0 \xrightarrow{M\to\infty} c = -c' \approx 2Mx$
2. x kann Null werden $\xrightarrow{M\to\infty} c = x+s$ und $c' = x+s'$.

1. Fall $\eta'_0 \neq k'_0$ $(x\neq 0)$

Damit wird $c=-c' \approx 2Mx$

$$\left[\bar{u}(\vec{\eta}')\left(I^{\mu\nu}_{D_1}(\eta,\eta',k')+I^{\tau\nu}_{D_2}(\eta,\eta',k')\right)u(\vec{\eta})\right]^{(k)} \underset{M\to\infty}{=} 8(i\pi^2)\delta^{\nu_0}\delta^{\tau 0}$$

$$\times\Bigg\{\frac{1}{2x}\Bigg[-\frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{Mx}\ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right)$$

$$+\frac{\sqrt{(\lambda^2+2Mx)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{2Mx}\ln\left(\frac{-(\lambda^2+2Mx)+\sqrt{(\lambda^2+2Mx)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-(\lambda^2+2Mx)-\sqrt{(\lambda^2+2Mx)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right)$$

$$+\frac{\sqrt{(\lambda^2-2mx)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{2mx}\ \ln\left(\frac{-(\lambda^2-2mx)+\sqrt{(\lambda^2-2mx)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-(\lambda^2-2mx)-\sqrt{(\lambda^2-2mx)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right)\Bigg]\Bigg\} \tag{B.2.37}$$

Nun lasse ich $\lambda \to 0$ gehen, dann gilt $(\lambda^2+2mx) \simeq 2mx$. Außerdem setze ich $ai\varepsilon = i\varepsilon$ $(a>0)$ und lasse die überflüssigen $i\varepsilon$ weg. Man erhält

$$\left[\bar{u}(\vec{p}')\left(I_{D_1}^{\nu\tau}(p,p',k') + I_{D_2}^{\tau\nu}(p,p',k')\right)u(\vec{p})\right]^{(k)} \xrightarrow[m\to\infty]{\lambda\to 0} 8(i\pi^2)\delta^{\nu_0}\delta^{\tau 0}$$

$$\times\frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2}}{4mx^2}\ \ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+i\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+i\varepsilon}}\right) \xrightarrow{\lambda\to 0} 0 \tag{B.2.38}$$

Die Summe der beiden Diagramme wird Null, d.h. $I_3 \to 0$.

2. Fall k'_0 kann gleich p'_0 sein, d.h. X kann Null werden

Um diesen Fall zu untersuchen, schreibe ich für die Summe der beiden Diagramme

$$I_3 = \beta(-ze^2)\int d^4k'\ I^{(k)}_{m\to\infty}(p,p',k')\ \ I^{rest}(p,p',k')$$

$$= \beta(-ze^2)\int d\vec{k}'\left\{\int_{-\infty}^{p'_0-\Delta} dk'_0 + \int_{p'_0+\Delta}^{\infty} dk'_0 + \int_{p'_0-\Delta}^{p'_0+\Delta} dk'_0\right\}$$

$$\times\ I^{(k)}_{m\to\infty}(p,p',k')\ I^{rest}(p,p',k'), \tag{B.2.39}$$

wobei

$$I^{(k)}_{m\to\infty}(p,p',k') \equiv \lim_{m\to\infty}\left[\bar{u}(\vec{p}')\left(I_{D_1}^{\nu\tau}(p,p',k') + I_{D_1}^{\tau\nu}(p,p',k')\right)u(\vec{p})\right]^{(k)} \tag{B.2.40}$$

ist. $I^{rest}(p,p',k')$ ist in (B.2.2) definiert und Δ ist beliebig klein. Da in den Integralen $\int_{-\infty}^{p'_0-\Delta} dk'_0$ und $\int_{p'_0+\Delta}^{\infty} dk'_0$ $k'_0 \neq p'_0$ ist, wird $I^{(k)}_{m\to\infty}(p,p',k')=0$ (siehe den 1. Fall und Gleichung (B.2.38)) und diese Integrale geben keinen Beitrag. Dann ist:

$$I_3 = \beta(-ze^2)\int d\vec{k}'\int_{p'_0-\Delta}^{p'_0+\Delta} dk'_0\ \ I^{(k)}_{m\to\infty}(p,p',k')\ I^{rest}(p,p',k') \tag{B.2.41}$$

Da hier $|k'_0-p'_0| \leq \Delta$ ist, Δ beliebig klein, kann man schreiben:

$$I^{rest} \simeq \left[\bar{u}(-\vec{p}') \left(\gamma_\nu \frac{\gamma^0(\beta_0 W - p_0') - \vec{\gamma}\vec{k}' + m}{(\beta_0 W - p_0')^2 - e_{k'}^2 + i\varepsilon} \gamma_\tau \right) u(-\vec{p}) \right]^{(e)} \frac{1}{-(\vec{k}'-\vec{p}')^2 + i\varepsilon} \frac{1}{-(\vec{p}-\vec{k}')^2 + i\varepsilon} \tag{B.2.42}$$

Dabei wurde $p_0 = p_0'$ benutzt (siehe 3.1.2b). Durch Einsetzen von (B.2.42) in (B.2.41) erhalte ich:

$$I_3 = \beta(-2e^2) \int d\vec{k}' \left[\bar{u}(-\vec{p}') \left(\gamma_\nu \frac{\gamma^0(\beta_0 W - p_0') - \vec{\gamma}\vec{k}' + m}{(\beta_0 W - p_0')^2 - e_{k'}^2 + i\varepsilon} \gamma_\tau \right) u(-\vec{p}) \right]^{(e)}$$

$$\times \frac{1}{-(\vec{k}'-\vec{p}')^2 + i\varepsilon} \frac{1}{-(\vec{p}-\vec{k}')^2 + i\varepsilon} \int_{p_0'-\Delta}^{p_0'+\Delta} dk_0' \; \underset{u\to\infty}{I^{(k)}}(p, p', k') \tag{B.2.43}$$

Nun ist das Integral

$$I_\Delta = \int_{p_0'-\Delta}^{p_0'+\Delta} dk_0' \; \underset{u\to\infty}{I^{(k)}}(p, p', k')$$

$$= \int_{p_0'-\Delta}^{p_0'+\Delta} dk_0' \lim_{u\to\infty} \left[\bar{u}(\vec{p}') \left(I_{D_1}^{\nu\tau}(p, p', k') + I_{D_2}^{\tau\nu}(p, p', k') \right) u(\vec{p}) \right]^{(e)} \tag{B.2.44}$$

zu berechnen. Dafür setze ich (B.2.32-37) in (B.2.44) ein und führe die Transformation $k_0' = x + p_0'$ durch:

$$I_\Delta = I_{\Delta_1} + I_{\Delta_2}$$

$$I_{\Delta_1} \underset{u\to\infty}{=} 8(i\pi^2)\delta^{\nu 0}\delta^{\tau 0} \int_{-\Delta}^{\Delta} dx \left\{ \frac{-1}{2(x+s)^2} \left[\left(\frac{\lambda^2(x+s)}{2\sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}} \right.\right.\right.$$

$$\left. + \frac{\sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{4u} \right) \ln \left(\frac{-\lambda^2 + \sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{-\lambda^2 - \sqrt{\lambda^4 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}} \right) - (x+s)$$

$$\left.\left. - \frac{\sqrt{(\lambda^2 + 2u(x+s))^2 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{4u} \ln \left(\frac{-\lambda^2 - 2u(x+s) + \sqrt{(\lambda^2 + 2u(x+s))^2 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}}{-\lambda^2 - 2u(x+s) - \sqrt{(\lambda^2 + 2u(x+s))^2 - 4a\lambda^2 + 4ai\varepsilon}} \right) \right] \right\}$$

$$\equiv \int_{-\Delta}^{\Delta} dx \; f_1(x) \tag{B.2.45}$$

Dabei habe ich in (B.2.45) den Faktor $\frac{1}{x+s}$ ausgeklammert und analog schreibe ich:

$$I_{\Delta_2} \underset{M\to\infty}{=} 8(i\pi^2)\,\delta^{\mu 0}\delta^{\varepsilon 0}\int_{-\Delta}^{\Delta} dx\;\Bigg\{\frac{-1}{2(-x+s')}\Bigg[\Bigg(\frac{\lambda^2(-x+s')}{2\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}$$

$$+\;\frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{4M}\Bigg)\ln\Bigg(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\Bigg)-(-x+s')$$

$$-\;\frac{\sqrt{(\lambda^2+2M(-x+s'))^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{}\ln\Bigg(\frac{-\lambda^2-2M(-x+s')+\sqrt{(\lambda^2+2M(-x+s'))^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-2M(-x+s')-\sqrt{(\lambda^2+2M(-x+s'))^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\Bigg)\Bigg]$$

$$\equiv \int_{-\Delta}^{\Delta} dx\, f_2(x) \qquad \text{(B.2.46)}$$

Der Integrand von I_{Δ_1} wird für X=-S gleich $\frac{0}{0}$ und der Integrand von I_{Δ_2} wird für X=S' ebenfalls gleich $\frac{0}{0}$. Nun wende ich die l'Hospitalsche Regel an. Die Zähler ergeben eine Konstante und die Nenner werden gleich 4. D.h. die Integrale I_{Δ_1} und I_{Δ_2} existieren für X=-S bzw. X=+S'. Analog habe ich die anderen Singularitäten der Integranden untersucht und herausgefunden, daß die beiden Integrale im Intervall $(-\Delta, \Delta)$ existieren. Nun schreibe ich:

$$I_\Delta = I_{\Delta_1} + I_{\Delta_2} = \int_{-\Delta}^{\Delta} dx\,\big[f_1(x)+f_2(x)\big] = \int_{-\Delta}^{\Delta} dx\, f(x) \qquad \text{(B.2.47)}$$

Ich schließe den Integrationsweg in der komplexen X-Ebene oben (siehe Abb. B.2.1) und benutze den Cauchyschen Integralsatz.

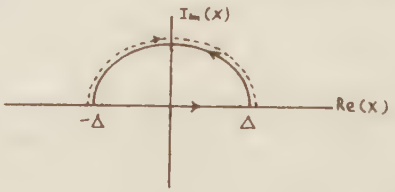


Abb. B.2.1 Der Integrationsweg in der komplexen X-Ebene

$$I_\Delta = \int_{\curvearrowleft} dx\, f(x) + \int_{\curvearrowright} dx\, f(x) = \int_{\curvearrowright} dx\, f(x) \qquad \text{(B.2.48)}$$

Nun ist $x \neq 0$, d.h. für $M \to \infty$ wird Mx sehr groß und $x+s \simeq x$, $-x+s \simeq -x$, da s und s' von der Ordnung $\frac{1}{M}$ sind. Ich kann nun schreiben: $\sqrt{(\lambda^2+2Mx)^2-4a\lambda^2+4ai\varepsilon} \approx 2M\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}$ mit $\lambda \neq \Delta$, da beliebig ist. Damit wird:

$$I_\Delta = 8(i\pi^2)\delta^{\nu_0}\delta^{\tau 0}\int_{\nearrow} dx \left\{ \frac{-1}{2x^2}\left[\left(\frac{\lambda^2 x}{2\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}} + \frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{4M}\right)\ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right) - x \right.\right.$$

$$\left. - \frac{\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{2}\ln\left(\frac{-x+\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{-x-\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}\right)\right] - \frac{1}{2x^2}\left[\left(\frac{-\lambda^2 x}{2\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}} + \frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{4M}\right)\ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+4ai\varepsilon}}\right) + x \right.$$

$$\left.\left. - \frac{\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{2}\ln\left(\frac{x+\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{x-\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}\right)\right]\right\} \qquad \text{(B.2.49)}$$

Da $a \approx M^2 > 0$, setze ich $ai\varepsilon = i\varepsilon$ und lasse die überflüssigen $i\varepsilon$ weg:

$$I_\Delta = 8(i\pi^2)\delta^{\nu_0}\delta^{\tau 0}\int_{\nearrow} dx \frac{-1}{2x^2}\left\{\frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2}}{2M}\ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+i\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+i\varepsilon}}\right)\right.$$

$$- \frac{\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{2}\ln\left(\frac{-x+\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{-x-\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}\right) - \frac{\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{2}$$

$$\left.\times \ln\left(\frac{-x-\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}{-x+\sqrt{x^2-\lambda^2+i\varepsilon}}\right)\right\}$$

$$= 8(i\pi^2)\delta^{\nu_0}\delta^{\tau 0}\int_{\nearrow} dx \frac{-1}{2x^2}\frac{\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2}}{2M}\ln\left(\frac{-\lambda^2+\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+i\varepsilon}}{-\lambda^2-\sqrt{\lambda^4-4a\lambda^2+i\varepsilon}}\right) \xrightarrow{\lambda \to 0} 0$$

$$\text{(B.2.50)}$$

und damit ist $I_3 = 0$.

Also gilt allgemein:

(B.2.51)

Anhang C Lösungen der Dirac-Gleichung

C.1 Elektron im Coulomb-Feld

Die Dirac-Gleichung für die Bewegung eines Elektrons im Coulomb-Feld eines punktförmigen Kerns lautet:

$$H\psi(\vec{r}) = (\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m + V(r))\psi(\vec{r}) = \omega\psi(\vec{r}) \qquad (C.1.1)$$

Da $V(r) = -\frac{z\alpha}{r}$ ein zentrales Potential (unabhängig von der Richtung von r) ist, vertauscht der Hamilton-Operator H mit J bzw. J^2 und J_z. Außerdem kommutiert er mit $K = \beta(\vec{\sigma}\cdot\vec{l}+1)$ und mit dem Paritätsoperator[59]. Deshalb ist man an Lösungen interessiert, die gleichzeitig Eigenfunktionen dieser Operatoren sind. Eine solche Lösung läßt sich wie folgt schreiben:

$$\psi(\vec{r}) \equiv \psi^{\mu}_{\varkappa}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} f_{\varkappa,\omega}(r)\,\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{r}) \\ i\,g_{\varkappa,\omega}(r)\,\chi^{\mu}_{-\varkappa}(\hat{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{r}) & 0 \\ 0 & i\chi^{\mu}_{-\varkappa}(\hat{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\varkappa,\mu}(r) \\ g_{\varkappa,\mu}(r) \end{pmatrix}$$

$$\equiv \varphi^{\mu}_{l,\varkappa}(\hat{r})\,\psi_{\varkappa,\omega}(r), \qquad (C.1.2)$$

wobei $\chi^{\mu}_{\varkappa}(\hat{r}) = \sum_{m=\pm\frac{1}{2}} \langle l_{\varkappa}, \mu-m, \tfrac{1}{2}\, m \,|\, j\, m\rangle\, Y_{l_{\varkappa},\mu-m}(\hat{r})\; |\tfrac{1}{2}, m\rangle,$ (C.1.3)

$l_{\varkappa} = |\varkappa+\frac{1}{2}| - \frac{1}{2}$, $l_{-\varkappa} = |\varkappa-\frac{1}{2}| - \frac{1}{2}$, $j = |\varkappa| - \frac{1}{2}$, der sogenannte Kugelspinor und $|\frac{1}{2}, m\rangle$ die Spineigenfunktion ist. Durch Einsetzen von (C.1.2) in (C.1.1) unter Beachtung der Relation

$$\int d\hat{r}\; \varphi^{\mu}_{l,\varkappa}(\hat{r})\, \varphi^{\mu'}_{l,\varkappa'}(\hat{r}) = \delta^{\mu\mu'}\,\delta_{\varkappa\varkappa'} \qquad (C.1.4)$$

erhält man die Radialgleichung:

$$\begin{pmatrix} m + V(r) - \omega & -\frac{d}{dr} + \frac{\varkappa-1}{r} \\ \frac{d}{dr} + \frac{\varkappa+1}{r} & -m + V(r) - \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\varkappa,\omega}(r) \\ g_{\varkappa,\omega}(r) \end{pmatrix} = 0 \qquad (C.1.5)$$

Der Ansatz

$$f_{\varkappa,\omega} = \frac{1}{r}\sqrt{m+\omega}\;(\Phi_1 + \Phi_2) \qquad (C.1.6a)$$

$$g_{\varkappa,\omega} = \frac{1}{r}\sqrt{m-\omega}\;(\Phi_1 - \Phi_2) \qquad (C.1.6b)$$

$$\varkappa = 2\lambda r\,,\quad \gamma = z\alpha\,,\quad \lambda = \sqrt{m^2-\omega^2} \qquad (C.1.6c)$$

führt dann zu der folgenden Gleichung:

$$\begin{cases} \frac{d\Phi_2}{dx} = \left(\frac{-\kappa}{x} + \frac{\gamma m}{\lambda x}\right)\Phi_1 - \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma w}{\lambda x}\right)\Phi_2 & \text{(C.1.7a)} \\ \frac{d\Phi_1}{dx} = -\left(\frac{\kappa}{x} + \frac{\gamma m}{\lambda x}\right)\Phi_2 + \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma w}{\lambda x}\right)\Phi_1 & \text{(C.1.7b)} \end{cases}$$

Nach Eliminieren von Φ_1 in (C.1.7a-7b) ergibt sich:

$$\frac{d^2 m}{dx^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{1}{x}\left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma w}{\lambda}\right) + \frac{\frac{1}{4} - s^2}{x^2}\right] m = 0, \qquad \text{(C.1.8)}$$

wobei $m = \sqrt{x}\,\Phi_2$ und $s^2 = \kappa^2 - \gamma^2$ ist. Diese Differentialgleichung definiert die konfluente hypergeometrische Funktion. Die im Ursprung reguläre Lösung ist die erste Whittaker-Funktion[60]:

$$m \equiv N_1\, M_{\nu+\frac{1}{2},s}(x) = e^{-x/2}\, x^{s+1/2}\, \Phi(s-\nu, 2s+1, x) \qquad \text{(C.1.9)}$$

und die bei $r=\infty$ reguläre Lösung ist die zweite Whittaker-Funktion[60]:

$$m \equiv N_2\, W_{\nu-\frac{1}{2},s}(x) = e^{-x/2}\, x^{s+1/2}\, \Psi(s-\nu, 2s+1, x), \qquad \text{(C.1.10)}$$

wobei $\nu = \frac{\gamma w}{\lambda}$, $s = \sqrt{\kappa^2 - \gamma^2}$ ist. Φ und Ψ sind die hypergeometrischen[4] Funktionen. W und M sind mehrdeutige Funktionen in der komplexen X-Ebene; ihre Hauptzweige sind durch $|\arg x| < \pi$ definiert. Anhand der Gleichungen (C.1.9), (C.1.10) und (C.1.7a) erhält man Φ_1. Damit ist die bei $r=0$ reguläre Lösung der Dirac-Gleichung gegeben durch:

$$M_\kappa(r,\omega) \equiv \begin{pmatrix} M_\kappa^{(1)}(r,\omega) \\ M_\kappa^{(2)}(r,\omega) \end{pmatrix}$$

$$= c_1 \begin{pmatrix} \frac{m+w}{r^{3/2}}\left[(s-\nu)\, M_{\nu-1/2,s}(2\lambda r) - \left(\kappa - \frac{\gamma m}{\lambda}\right) M_{\nu+1/2,s}(2\lambda r)\right] \\ \frac{\lambda}{r^{3/2}}\left[(s-\nu)\, M_{\nu-1/2,s}(2\lambda r) + \left(\kappa - \frac{\gamma m}{\lambda}\right) M_{\nu+1/2,s}(2\lambda r)\right] \end{pmatrix} \qquad \text{(C.1.11)}$$

und die exponentiell abfallende Lösung bei $r=\infty$ durch:

$$W_\varkappa(r,\omega) \equiv \begin{pmatrix} W_\varkappa^{(1)}(r,\omega) \\ \\ W_\varkappa^{(2)}(r,\omega) \end{pmatrix}$$

$$= c_2 \begin{pmatrix} \frac{m+\omega}{r^{3/2}} \left[(\varkappa + \frac{\gamma m}{\lambda}) W_{\nu-1/2,s}(2\lambda r) + W_{\nu+1/2,s}(2\lambda r) \right] \\ \\ \frac{\lambda}{r^{3/2}} \left[(\varkappa + \frac{\gamma m}{\lambda}) W_{\nu-1/2,s}(2\lambda r) - W_{\nu+1/2,s}(2\lambda r) \right] \end{pmatrix}, \qquad \text{(C.1.12)}$$

wobei $c_1 = \frac{N_1}{\sqrt{\lambda(m+\omega)}\,(\frac{\gamma m}{\lambda} - \varkappa)}$ und $c_2 = \frac{N_2}{\sqrt{\lambda(m+\omega)}}$ ist.

Für $\omega < m$ stellen die Gleichungen (C.1.11) und (C.1.12) die nicht renormierten radialen Wellenfunktionen der gebundenen Zustände des Elektrons dar. In diesem Fall ist W also bis auf eine Konstante identisch mit M und daraus folgt für die Bindungsenergien:

$$W_\varkappa^{(1)}(r,\omega)\, M_\varkappa^{(2)}(r,\omega) - W_\varkappa^{(2)}(r,\omega)\, M_\varkappa^{(1)}(r,\omega) = 0 \,. \qquad \text{(C.1.13)}$$

Außerdem gilt:

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, M^+ M = 1 \,, \qquad \int_0^\infty dr\, r^2\, W^+ W = 1 \,.$$

Für $\omega \gg m$ stellen die Gleichungen (C.1.11) und (C.1.12) die nicht renormierten radialen Wellenfunktionen der Kontinuumzustände des Elektrons dar und nur die bei $r=0$ reguläre Lösung, welche in der Form

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, M_\varkappa^+(r,\omega)\, M_\varkappa(r,\omega') = \delta(\omega-\omega')$$

normiert ist, gibt die physikalische Lösung an.

C.2 Freies Elektron und Elektron im konstanten Potential

Man kann die Lösungen der Dirac-Gleichung für ein freies Elektron aus den Lösungen der Dirac-Gleichung für ein Elektron im Coulomb-Feld gewinnen, indem man in (C.1.1) $V(r)=0$ bzw. in (C.11-12) $\gamma=0$ einsetzt. Damit erhält man für die Lösung, die im Ursprung regulär ist

$$u_\varkappa(r,\omega) \equiv \begin{pmatrix} u_\varkappa^{(1)}(r,\omega) \\ u_\varkappa^{(2)}(r,\omega) \end{pmatrix} = c_3 \begin{pmatrix} (m+\omega)\, j_{\ell_\varkappa}(i\lambda r) \\ i\lambda \frac{\varkappa}{|\varkappa|}\, j_{\ell_{-\varkappa}}(i\lambda r) \end{pmatrix} \qquad (C.2.1)$$

und für die exponentiell abfallende Lösung bei

$$v_\varkappa(r,\omega) \equiv \begin{pmatrix} v_\varkappa^{(1)}(r,\omega) \\ v_\varkappa^{(2)}(r,\omega) \end{pmatrix} = c_4 \begin{pmatrix} -\lambda\, h^{(1)}_{\ell_\varkappa}(i\lambda r) \\ i\frac{\varkappa}{|\varkappa|}(\omega-m)\, h^{(1)}_{\ell_{-\varkappa}}(i\lambda r) \end{pmatrix}. \qquad (C.2.2)$$

Dabei ist $j_{\ell\varkappa}$ die sphärische Bessel-Funktion der ersten Art, und $h^{(1)}_{\ell\varkappa}(x)$ ist die Hankel-Funktion[65]. Physikalisch ist die bei $r=0$ reguläre Lösung relevant, und C_3 ist durch die Normierung

$$\int_0^\infty dr\, r^2\; u_\varkappa^\dagger(r,\omega)\, u_\varkappa(r,\omega') = \delta(\omega-\omega')$$

festgelegt.

Analog erhält man die Lösung der Dirac-Gleichung für ein Elektron im konstanten Potential $V(r)=-\frac{\gamma}{R}$ aus den Lösungen der Dirac-Gleichung für ein freies Elektron, indem man die Energie ω durch $\tilde{\omega} = \omega - V(r) = \omega + \frac{\gamma}{R}$ ersetzt.

Anhang D Konstruktion der radialen Greensfunktion für die Dirac-Gleichung

Die Konstruktion der radialen Greensfunktion für die Dirac-Gleichung verläuft im Prinzip wie die Konstruktion der Greensfunktion für eine gewöhliche lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung[15,24,18,61]. Das bedeutet:

$$G_\kappa(r',r,\omega) = \frac{1}{J_\kappa(\omega)} \left\{ \theta(r-r') \Psi_{R,\kappa}(r',\omega) \Psi^T_{I,\kappa}(r,\omega) + \theta(r'-r) \Psi_{I,\kappa}(r',\omega) \Psi^T_{R,\kappa}(r,\omega) \right\}, \tag{D.1a}$$

wobei $\Psi_{R,\kappa} \equiv \begin{pmatrix} \Psi^{(1)}_{R,\kappa} \\ \Psi^{(2)}_{R,\kappa} \end{pmatrix}$ die reguläre Lösung für $r \to 0$ und $\Psi_{I,R} \equiv \begin{pmatrix} \Psi^{(1)}_{I,\kappa} \\ \Psi^{(2)}_{I,\kappa} \end{pmatrix}$ die exponentiell abfallende für $r \to \infty$ ist. T steht für das Transponieren und κ ist in Anhang C definiert. Die Wronski-Determinante ist gegeben durch:

$$J_\kappa(\omega) = r^2 \left[\Psi^{(2)}_{R,\kappa}(r,\omega) \Psi^{(1)}_{I,\kappa}(r,\omega) - \Psi^{(1)}_{R,\kappa}(r,\omega) \Psi^{(2)}_{I,\kappa}(r,\omega) \right]. \tag{D.2a}$$

Man kann anhand der Radialgleichung (C.1.5) zeigen, daß gilt:

$$\frac{dJ_\kappa(\omega)}{dr} = 0 , \tag{D.3a}$$

d.h. die Wronski-Determinante ist unabhängig von r. Da im Falle der Bindungszustände die regulären Lösungen für r=0 und $r = \infty$ bis auf eine Konstante gleich sind, ist die Klammer in (D.2a) identisch Null, und damit ist $J_\kappa(\omega)=0$. Dies bedeutet, daß $J_\kappa(\omega)$ bei den Bindungsenergien einfache Nullstellen bzw. G_κ einfache Pole hat. Außerdem kann man mittels (D.1a) zeigen, daß G_κ für $V(r) \neq 0$ bzw. $V(r) \neq$ const. Verzweigungspunkte bei $\omega = \pm m$ hat. D.h. in der komplexen ω-Ebene hat G_κ (für $V(r) \neq 0$ bzw. $V(r) \neq$ const.) einen Schnitt bei $\omega = +m$ und einen Schnitt bei $\omega = -m$ sowie eventuell einfache Pole zwischen den beiden Schnitten (dies hängt vom Potential $V(r)$ ab), siehe etwa Abb. 4.2. Aus der Gleichung (D.1a) ist ersichtlich, daß für $\omega \neq \omega_b$ (ω_b =Bindungsenergien) $G_\kappa(r',r,\omega)$ als Funktion von r (bzw. r') regulär im Ursprung und im Unendlichen ist, wenn man r' bzw. r festhält.

D.1 Die Greensfunktion für $V(r)=0$ bzw. $V(r)=\text{const}$

Die regulären Lösungen der Dirac-Gleichung für $V(r)=0$ sind in Anhang C.2 angegeben. Damit folgt aus der Gleichung (D.1a):

$$G_\kappa^\circ(r,r',\omega) = \frac{1}{J_\kappa^\circ(\omega)} \left\{ \theta(r-r')\, u_\kappa(r,\omega)\, v_\kappa^T(r',\omega) + \theta(r'-r)\, v_\kappa(r,\omega)\, u_\kappa^T(r',\omega) \right\} \tag{D.1.1}$$

$$\begin{aligned} J_\kappa^\circ(\omega) &= r^2 \left\{ u_\kappa^{(2)}(r,\omega)\, v_\kappa^{(1)}(r,\omega) - u_\kappa^{(1)}(r,\omega)\, v_\kappa^{(2)}(r,\omega) \right\} \\ &= r^2 \left\{ i\lambda \frac{\kappa}{|\kappa|} j_{|\kappa-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}(i\lambda r)\cdot(-\lambda)\, h^{(1)}_{|\kappa+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}(i\lambda r) \right. \\ &\quad \left. -(m+\omega)\, j_{|\kappa+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}(i\lambda r)\, i(\omega-m)\, h^{(1)}_{|\kappa-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}(i\lambda r) \right\} \end{aligned} \tag{D.1.2}$$

Durch Einsetzen von $h_n^{(1)}(z) = j_n(z) + i y_n(z)$ in (D.1.2) und die Verwendung der Relation[56]:

$$j_n(z)\, y_{n-1}(z) - j_{n-1}(z)\, y_n(z) = \frac{1}{z^2} \tag{D.1.3}$$

ergibt sich:

$$J_\kappa^\circ(\omega) \equiv [u,v] = 1. \tag{D.1.4}$$

Dies gilt auch für ein konstantes Potential, da $J_\kappa^\circ(\omega)$ unabhängig von ω ist, und deshalb kann man schreiben:

$$J_\kappa^\circ(\tilde\omega) = J_\kappa^\circ\left(\omega + \frac{\gamma}{R}\right) \equiv [\tilde u, \tilde v] = 1. \tag{D.1.5}$$

Die Greensfunktion für ein konstantes Potential $\tilde G_\kappa^\circ(r,r',\tilde\omega)$ erhält man aus $G_\kappa^\circ(r,r',\omega)$, indem man die Energie ω durch $\tilde\omega = \omega + \frac{\gamma}{R}$ bzw. $u \to \tilde u, v \to \tilde v$ ersetzt:

$$\tilde G_\kappa^\circ(r,r',\tilde\omega) = \theta(r-r')\, \tilde u_\kappa(r,\tilde\omega)\, \tilde v_\kappa^T(r',\tilde\omega) + \theta(r'-r)\, \tilde v_\kappa(r,\tilde\omega)\, \tilde u_\kappa^T(r',\tilde\omega). \tag{D.1.6}$$

D.2 Die Greensfunktion für ein Coulomb-Potential $(V(r) = -\frac{\gamma}{r})$

In diesem Fall erhält man aus (C.1.11-12) und (D.1a):

$$G_\kappa^c(r',r,\omega) = \frac{1}{J_\kappa^c(\omega)} \left\{ \theta(r-r')\, M_\kappa(r',\omega) W_\kappa^T(r,\omega) + \theta(r-r')\, W_\kappa(r,\omega) M_\kappa^T(r,\omega) \right\} \tag{D.2.1}$$

$$J_\kappa^c(\omega) \equiv [M,W] = r^2 \left[M_\kappa^{(2)}(r,\omega)\, W_\kappa^{(1)}(r,\omega) - M_\kappa^{(1)}(r,\omega)\, W_\kappa^{(2)}(r,\omega) \right] \tag{D.2.2}$$

Da $J_\kappa^c(\omega)$ unabhängig von r ist (siehe D.2a), kann man schreiben:

$$J_\kappa^c(\omega) = [M,W] = \lim_{r\to 0} [M,W] = 4\lambda^2 (m+\omega) \frac{\Gamma(2s+1)}{\Gamma(s-\nu)}, \tag{D.2.3}$$

$$s = \sqrt{\kappa^2 - (z\alpha)^2}\ , \quad \nu = \frac{\gamma\omega}{\lambda}\ , \quad \lambda = \sqrt{m^2-\omega^2}\ , \quad \gamma = z\alpha. \tag{D.2.4}$$

Die Nullstellen von $J_\kappa^c(\omega)$ (d.h. die Pole von $\Gamma(s-\nu)$) liefern die Sommerfeld'sche Feinstruktur-Formel für die gebundenen Zustände:

$$s - \nu = -n' \ , \qquad n' = 0, 1, 2, \ldots \tag{D.2.5}$$

$$\sqrt{\kappa^2 - (z\alpha)^2} - \frac{z\alpha\omega}{\lambda} = -n' \tag{D.2.6}$$

$$\omega \equiv \omega_n = m \left[1 + \left(\frac{z\alpha}{n-1+\sqrt{\kappa^2-(z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad n = n'+1 \tag{D.2.7}$$

Damit ergibt sich die Grundzustandsenergie $(n=1, \kappa=-1)$ zu:

$$\omega_{1s_{1/2}} = m\sqrt{1-(z\alpha)^2} \tag{D.2.8}$$

Anhang E Berechnung der Whittaker-Funktionen

E.1 Berechnung von $M_{k,\mu}(X)$

Die Whittaker-Funktion $M_{k,\mu}(X)$ ist gegeben durch[56,60]:

$$M_{k,\mu}(X) = e^{-X/2}\, X^{c/2}\, \Phi(a,c,X) \qquad \text{(E.1.1a)}$$

wobei $a=\mu+\frac{1}{2}-k$, $c=2\mu+1$ und $\Phi(a,c,X)$ die konfluente hypergeometrische Funktion ist. Ich habe für sie die Integraldarstellung

$$\Phi(a,c,X) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\cdot\Gamma(c-a)}\, e^{X} \int_0^1 dt\, e^{-Xt}\,(1-t)^{a-1}\, t^{c-a-1} \qquad \mathrm{Re}(c)>\mathrm{Re}(a)>0$$

$$\equiv \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\cdot\Gamma(c-a)}\, e^{X}\, \varphi_1(a,c,X) \qquad \text{(E.1.2)}$$

verwendet. Bei der Berechnung von $SP(G_{\lambda=1}(z\alpha,\gamma,\gamma i\vartheta))$ kommen die Whittaker-Funktionen $M_{\nu\pm\frac{1}{2},s}(2\lambda r)$ vor, wobei

$s=\sqrt{1-\gamma^2}$, $\gamma=z\alpha$, $X=2\lambda r$, $\lambda=\sqrt{m^2+y^2}$ und $\nu=\frac{i\gamma y}{\lambda}$ ist. y variiert von Null bis unendlich. Ich betrachte für den allgemeinen Fall $r=z+iy$ mit $0\leqslant z\leqslant\infty$, $-\infty\leqslant y\leqslant\infty$.
Für $M_{\nu-1/2,s}(X)$ ist $a=1-\nu+s$ und $c=2s+1$. Damit ist $\mathrm{Re}(a)>0$ und

$$\mathrm{Re}(c-a)\begin{cases} >0 & z\alpha<1 \\ =0 & z\alpha\geqslant 1 \end{cases}.$$

D.h. für $z\alpha\geqslant 1$ kann man die Integraldarstellung (E.1.2) nicht verwenden. Daher benutze ich die Rekursionsformel:

$$\Phi(a,c,X) = \frac{1}{c(c+1)}\left\{(c+1)(c+X)\Phi(a,c+1,X) - (c+1-a)X\,\Phi(a,c+2,X)\right\} \qquad \text{(E.1.3)}$$

Die Funktionen $\Phi(a,c+1,X)$ und $\Phi(a,c+2,X)$ berechne ich mit der Integraldarstellung (E.1.2) und damit dann $\Phi(a,c,X)$. Für $M_{\nu+1/2,s}(X)$ gilt: $a_1=s-\nu=a-1$, $c_1=2s+1=c$.
Damit ist $\mathrm{Re}(c-a)>0$ und $\mathrm{Re}(a)\begin{cases} >0 & z\alpha<1 \\ =0 & z\alpha\geqslant 1 \end{cases}$.
D.h. wiederum kann man für $z\alpha\geqslant 1$ die Gleichung (E.1.2) nicht für $M_{\nu+1/2,s}(X)$ verwenden. Deshalb benutze ich hier die Rekursionsformel:

$$\Phi(a_1,c,X) = \Phi(a_1+1,c+1,X) - \frac{(c-a_1)}{c(c+1)}\,\Phi(a_1+1,c+2,X) \qquad \text{(E.1.4)}$$

E.1.1 Berechnung von $\varphi_1(a,c,x)$

E.1.1.1 $Re(x) < 100$

Ich verwende ich Integraldarstellung aus (E.1.2)

$$\varphi_1(a,c,x) = \int_0^1 dt\, e^{-xt}\,(1-t)^{a-1}\,t^{c-a-1} \qquad \text{(E.1.5)}$$

Es ist nicht sinnvoll, das Integral (E.1.5) in dieser Form mittels Gauß-Integration zu berechnen, denn erstens oszilliert der Integrand für $Im\,x \gg 1$ wegen e^{-xt} stark und zweitens kann er für bestimmte a und c unendlichen Anstieg bei t=0 oder t=1 haben (z.B. wie $\sqrt{x}$). Deswegen mache ich folgende Fallunterscheidungen (Fall A und Fall B).

Fall A $\quad 0 \leq Im(x) \leq \pi$

Für diesen Bereich von X oszilliert der Integrand nicht mehr, jedoch kann er immer noch bei t=0 oder t=1 unendlichen Anstieg haben. Daher zerlege ich das Integral folgendermaßen:

$$\varphi_1(a,c,x) = \int_0^{1/2} dt\, e^{-xt}\,(1-t)^{a-1}\,t^{c-a-1} + e^{-x}\int_0^{1/2} dt\, e^{-xt}\,(1-t)^{c-a-1}\,t^{a-1}$$

$$\equiv I_1(1/2, x, a, ca) + e^{-x}\, I_1(1/2, -x, ca, a), \qquad \text{(E.1.6)}$$

$$ca \equiv c-a \qquad \text{(E.1.7)}$$

Nun kann ich I_1 durch die Entwicklung von $e^{\pm xt}$ und $(1-t)^{\alpha}$ ($\alpha = a-1$ bzw. $\alpha = c-a-1$) nach Potenzreihen berechnen. Aber diese Entwicklung für $e^{\pm xt}$ ist nur sinnvoll, wenn $|x\cdot t|$ (hier $0 \leq |x\cdot t| < 50.02$) nicht groß ist, da sonst die Reihe für $e^{\pm xt}$ zu langsam konvergiert. Deshalb betrachte ich folgende Fälle:

1. $|x/2| \leq 1$

Hier konvergieren die Reihen für $e^{\pm xt}$ und $(1-t)^{\alpha}$ schnell, und daher schreibe ich z.B. für:

$$I_1\left(\tfrac{1}{2},x,a,c\alpha\right) = \sum_{n=0}^{N_1} (-)^n \frac{(a-1)(a-2)\cdots(a-n)}{n!} \int_0^{1/2} dt\, e^{-xt}\, t^{c-a+n-1}$$

$$\equiv \sum_{n=0}^{N1} T(n)\, I_0(n)\,, \qquad \text{(E.1.8)}$$

$$T(0)=1\,,\quad T(n) = -\frac{(a-n)}{n} T(n-1)\,,\quad (n=1,2,\cdots N1) \qquad \text{(E.1.9)}$$

$$I_0(n) \equiv \left(\tfrac{1}{2}\right)^{c-a+n} \sum_{m=0}^{N_0} T_0(m) \qquad \text{(E.1.10)}$$

$$T_0(0) = \frac{1}{c-a+n}\,,\quad T_0(m) = -\frac{c-a+n+m-1}{(c-a+n+m)\cdot m}\,(x/2)\, T_0(m-1)\,,\quad m=1,2,\cdots N_0 \qquad \text{(E.1.11)}$$

N_1 und N_0 lege ich über die Bestimmung der relativen Fehler fest. Für die Bestimmung des relativen Fehlers von $I_0(n)$ schreibe ich

$$I_0(n) = \left\{ \sum_{m=0}^{N_0} T_0(m) + \sum_{m=N_0+1}^{\infty} T_0(m) \right\} (1/2)^{c-a+n} \equiv (S_0+R_0)\cdot(1/2)^{c-a+n} \qquad \text{(E.1.12)}$$

Wegen (E.1.11) gilt:

$$|R_0| = |T_0(N_0+1) + T_0(N_0+2) + \cdots\cdots|$$

$$\leqslant |T_0(N_0+1)| \cdot \left[1 + \frac{|x/2|}{N_0+2} + \cdots\cdots\right] = \frac{|T_0(N_0+1)|}{1-\frac{|x/2|}{N_0+2}}\,. \qquad \text{(E.1.13)}$$

Damit beträgt der relative Fehler bei I_0

$$\left|\frac{R_0}{S_0}\right| \leqslant \left|\frac{T_0(N_0+1)}{S_0}\right| \cdot \frac{1}{1-\frac{|x/2|}{N_0+2}} \qquad \text{(E.1.14)}$$

Durch die Forderung, daß $\left|\frac{R_0}{S_0}\right| \leqslant 10^{-10}$ ist, lege ich N_0 fest. Analog schreibe ich:

$$I_1(1/2,x,a,c\alpha) = \sum_{n=0}^{N1} T(n)\, I_0(n) + \sum_{n=N_1+1}^{\infty} T(n)\cdot I_0(n) \equiv S+R \qquad \text{(E.1.15)}$$

Wegen $\left|\frac{I_0(N+1)}{I_0(N)}\right| \leqslant \frac{1}{2}$ erhalte ich für den relativen Fehler:

$$\frac{R}{S} \leqslant \frac{1}{2} \left| \frac{T(M_1+1)\cdot I_0(N_1+1)}{S} \right| \qquad \text{(E.1.16)}$$

Wiederum wird durch die Forderung $\left|\frac{R}{S}\right| < 10^{-10}$ festgelegt.
Analog erhält man

2. $|X/2| > 1$

Ich schreibe z.B. für

$$I_1(1/2, X, a, ca) = \int_0^{1/2x} dt\, e^{-xt} (1-t)^{a-1} t^{c-a-1}$$

$$+ \int_{1/2x}^{1/2} dt\, e^{-xt} (1-t)^{a-1} t^{c-a-1}$$

$$= I_1\left(\frac{1}{2x}, X, a, ca\right) + \frac{1}{X^{c-a}} \int_{1/2}^{X/2} dy\, e^{-y} \left(1-\frac{y}{X}\right)^{a-1} y^{c-a-1} \qquad \text{(E.1.17)}$$

Analog

$$I_1(1/2, -X, ca, a) = I_1\left(\frac{1}{2x}, -X, ca, a\right) + \frac{1}{X^a} \int_{1/2}^{X/2} dy\, e^{(y-X)} \left(1-\frac{y}{X}\right)^{c-a-1} y^{a-1} \qquad \text{(E.1.18)}$$

$I_1(1/2x, X, a, ca)$ und $I_1(1/2x, -X, ca, a)$ behandle ich wie Fall 1. Das zweite Integral in (E.1.17) und (E.1.18) berechne ich näherungsweise mittels Gauß-Integration. Für eine Genauigkeit von 6 Stellen benötige ich für $Re(x) < 1$ etwa 10 Gauß-Punkte und für $Re(x) \gg 1$ etwa 32-40 Gauß-Punkte.

Fall B $\quad \pi < I_m(X) \leqslant \infty$

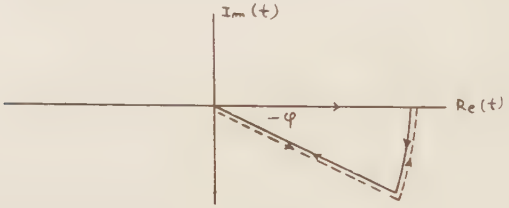
Da jetzt der Integrand stark oszillieren kann, zerlege ich zunächst das Integral (E.1.5) in folgender Weise:

$$\varphi_1(a,c,X) = \int_0^{\infty} dt\, e^{-Xt} (1-t)^{a-1} t^{c-a-1} - \int_1^{\infty} dt\, e^{-xt} (1-t)^{a-1} t^{c-a-1}$$

$$= \int_0^{\infty} dt\, e^{-xt} (1-t)^{a-1} t^{c-a-1} - e^{-X} \left(e^{i\varepsilon\pi}\right)^{a-1}$$

$$\times \int_0^{\infty} dt\, e^{-xt} (1+t)^{c-a-1} t^{a-1} \qquad \text{(E.1.19)}$$

Ich habe das Integral $\int_1^\infty dt$ addiert und subtrahiert, deshalb ist die Phase von $(1-t)^{a-1}$ für $t > 1$ durch das erste Integral festgelegt und man muß ε so wählen, daß diese Phase gleich der Phase von $(1-t)^{a-1}$ im ersten Integral ist. Da im ersten Integral die Phase $e^{i\pi(a-1)}$ auftritt, ist $\varepsilon = 1$.
Nun verschiebe ich den Integrationsweg im Komplexen wie folgt:



Dabei ist $\varphi = \arg(x)$. Dann folgt z.B. für das Integral:

$$\int_0^\infty dt\ e^{-xt}\ (1-t)^{a-1}\ t^{c-a-1} = \int_0^{\infty\cdot e^{i\varphi}} dt\ e^{-|x|\cdot e^{i\varphi}\cdot t}\ (1-t)^{a-1}\ t^{c-a-1}$$

$$= \frac{1}{x^{c-a}} \int_0^\infty dy\ e^{-y}\ \left(1-\frac{y}{x}\right)^{a-1}\ y^{c-a-1}$$

$$\equiv \frac{1}{x^{c-a}}\ I_2\ (0,\infty, x, a, ca) \qquad \text{(E.1.20)}$$

Damit ergibt sich

$$\varphi_1(a,c,x) = \frac{1}{x^{c-a}}\ I_2\ (0,\infty,x,a,ca) - \frac{e^{i\pi(a-1)}}{a}\ e^{-x}\ I_2(0,\infty,-x,ca,a) \qquad \text{(E.1.21)}$$

Da diese Integrale bei $y=0$ unendlichen Anstieg haben können, zerlege ich z.B.

$$I_2(0,\infty,x,a,ca) = \int_0^{1/2} dy\ e^{-y}\ \left(1-\frac{y}{x}\right)^{a-1}\ y^{c-a-1} + \int_{1/2}^\infty dy\ e^{-y}\left(1-\frac{y}{x}\right)^{a-1}\ y^{c-a-1}$$

$$= x^{c-a}\ I_1\ (1/2x, x, a, ca) + \int_{1/2}^\infty dy\ e^{-y}\ \left(1-\frac{y}{x}\right)^{a-1}\ y^{c-a-1} \qquad \text{(E.1.22)}$$

I_1 wird wie (E.1.1.1) behandelt und das zweite Integral berechne ich durch Gauß-Integration. Für eine Genauigkeit von mindestens 6 Stellen benötige ich etwa 24 Gauß-Punkte.

E.1.1.2 $Re(x) \geq 100$

In diesem Fall verwende ich die asymptotische Formel:

$$\varphi_1(a,c,x) \xrightarrow{Re(x)\to\infty} \Gamma(c-a)\, x^{-(c-a)} \left[1 - \frac{(c-a)(a+1)}{x} + \cdots\right] \quad \text{(E.1.23)}$$

Man bricht die Reihe ab, wenn der relative Fehler kleiner als 10^{-9} ist. Hier muß man beachten, daß $Re(a)$ bzw. $Re(c-a)$ nicht beliebig groß sein dürfen, da sonst die Reihe in (E.1.23) nicht konvergiert. Dies ist bei uns jedoch nicht der Fall.

E.2 Berechnung von $W_{k,\mu}(x)$

Die Whittaker-Funktion $W_{k,\mu}(x)$ ist gegeben durch[56,60]:

$$W_{k,\mu}(x) = e^{-x/2}\, x^{c/2}\, \Psi(a,c,x)\,, \qquad \text{(E.2.1a)}$$

wobei a, c wie bei $M_{k,\mu}(x)$ definiert sind. Für die konfluente hypergeometrische Funktion Ψ wähle ich folgende Integraldarstellung:

$$\Psi(a,c,x) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^\infty dt\; e^{-xt}\, t^{a-1}\, (1+t)^{c-a-1}$$

$$\equiv \frac{1}{\Gamma(a)}\, \Psi_1(a,c,x) \quad \text{und} \quad \mathrm{Re}(a)>0\,,\ \mathrm{Re}(x)>0 \qquad \text{(E.2.2)}$$

Bei der Berechnung von $sp(G_1(\pm z\alpha,\gamma,r,i\vartheta))$ kommen die Funktionen $W_{\nu\pm 1/2,s}(2\lambda r)$ vor, wobei ν, s, r wie bei $M_{\nu\pm 1/2,s}(2\lambda r)$ (siehe E.1) definiert sind. Für $W_{\nu-1/2,s}(2\lambda r)$ ist: $a = 1+s-\nu$ und $c = 2s+1$. Damit ist $\mathrm{Re}(a)>0$ für $z\alpha \gg 1$ oder $z\alpha < 1$, und die Darstellung (E.2.2) ist für sie gültig.
Für $W_{\nu+1/2,s}(2\lambda r)$ ist: $a_1 = s-\nu = a-1$ und $\mathrm{Re}(a_1)\begin{cases} >0 & z\alpha<1 \\ =0 & z\alpha\gg 1 \end{cases}$
Deshalb benutze ich für $z\alpha \gg 1$ die Rekursionsformel[56]:

$$\Psi(a_1,c,x) = -(c-a)\,\Psi(a_1+1,c,x) + x\,\Psi(a_1+1,c+1,x) \qquad \text{(E.2.3)}$$

und bestimme damit $W_{\nu+1/2,s}(x)$. D.h man kann die Darstellung (E.2.2) für die Berechnung von $W_{\nu\pm 1/2,s}(x)$ verwenden. Im folgenden wird gezeigt, wie man $\Psi_1(a,c,x)$ numerisch berechnet. Für $\Gamma(a)$ habe ich eine fertige Subroutine benutzt.

E.2.1 Berechnung von $\Psi_1(a,c,x)$

E.2.1.1 $0 < \mathrm{Re}(x) < 100$

Ich verwende die Integraldarstellung (E.2.2):

$$\Psi_1(a,c,x) = \frac{1}{x^a} \int_0^\infty dt\; e^{-t}\, \left(1+\frac{t}{x}\right)^{c-a-1}\, t^{a-1} \qquad \text{(E.2.4)}$$

Das Integral in (E.2.4) kann bei t=0 unendlichen Anstieg haben. Daher schreibe ich:

$$\Psi_1(a,c,x) = \frac{1}{x^a}\left\{\int_0^{1/2} dt\, e^{-t}\,(1+\tfrac{t}{x})^{c-a-1}\,t^{a-1} + \int_{1/2}^{\infty} dt\, e^{-t}\,(1+\tfrac{t}{x})^{c-a-1}\,t^{a-1}\right\} \qquad \text{(E.2.5)}$$

Das zweite Integral behandle ich mittels Gauß-Integration. Für eine Genauigkeit von mindestens 6 Stellen brauche ich etwa 24 Gauß-Punkte. Für die Berechnung des ersten Integral mache ich Fallunterscheidungen.

1. $|x| \geqslant 1$

Dann ist $|\frac{t}{x}|<1$ und ich benutze die Reihenentwicklung wie in (E.1.1.1).

2. $0<|x|<1$

In diesem Fall kann $|\frac{t}{x}| \geqslant 1$ werden. Deshalb schreibe ich:

$$\int_0^{1/2} dt\, e^{-t}\,(1+\tfrac{t}{x})^{c-a-1}\,t^{a-1} = \int_0^{x/2} dt\, e^{-t}\,(1+\tfrac{t}{x})^{c-a-1}\,t^{a-1}$$

$$+x^a \int_{1/2}^{1/2\,x} dy\, e^{-xy}\,(1+y)^{c-a-1}\,y^{a-1} \qquad \text{(E.2.6)}$$

Das erste Integral behandle ich wie Fall 1. Das zweite Integral läßt sich mit Hilfe des Gauß-Verfahrens gut errechnen. Für eine Genauigkeit von mindestens 6 Stellen braucht man etwa 24 Gauß-Punkte.

E.2.1.2 $\mathrm{Re}(x) \geqslant 100$

Ich verwende die asmptotische Formel

$$\Psi_1(a,c,x) \xrightarrow{x\to\infty} \frac{\Gamma(a)}{x^a}\left[1 + \frac{a(a-c-1)}{x} + \ldots\ldots\right] \qquad \text{(E.2.7)}$$

Da $\mathrm{Re}(a)$ und $\mathrm{Re}(c-a)$ nicht zu groß sind, konvergiert diese Reihe schnell.

Anhang F Berechnung von chi(z), z reell > 0

F.1 z ≤ 0.99

Ich benutze ich Reihenentwicklung für chi(z)[56]:

$$\mathrm{chi}(z) - \gamma_E - \ln(z) = \sum_{n=1} \frac{z^{2n}}{2n\cdot(2n)!}\,, \qquad (F.1.1)$$

$\gamma_E = 0.5772156649$ (Eulersche Konstante). Diese Reihe breche ich ab, wenn der relative Fehler weniger als 10^{-10} ist.

F.2 z > 0.99

Ich verwende die Integraldarstellung für chi(z)

$$\mathrm{chi}(z) - \gamma_E - \ln(z) = \int_0^z dt\ \frac{\cosh t - 1}{t} = \frac{1}{2}\int_0^z dt\ \frac{e^t - 1}{t} - \frac{1}{2}\int_0^z dt\ \frac{1-e^{-t}}{t}$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^z dt\ \frac{e^t - 1}{t} - \frac{1}{2}\left[e^{-z}\,\Psi(1,1,z) + \ln(z) + \gamma_E\right]$$

$$\equiv \frac{1}{2} I_1(z) - \frac{1}{2}\left[e^{-z}\,\Psi(1,1,z) + \ln(z) + \gamma_E\right] \qquad (F.2.1)$$

$\Psi(1,1,z)$ ist in Anhang E definiert. Zur Berechnung von $I_1(z)$ schreib ich:

$$I_1(z) = e^z\left\{\int_0^{z-1/2} dy\ \frac{e^{-y} - e^{-z}}{z-y} + \int_{z-1/2}^{z} dy\ \frac{e^{-y} - e^{-z}}{z-y}\right\}$$

$$\equiv e^z\, I_2(z) + \left[\ln(1/2) - \ln(z)\right] + S\,, \qquad (F.2.2)$$

$$S = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n\,n!}\left(\frac{1}{2}\right)^n \approx 0.570154205 \pm 1, \qquad (F.2.3)$$

$$I_2(z) \equiv \int_0^{z-1/2} dy\ \frac{e^{-y}}{z-y} \qquad (F.2.4)$$

Für $(Z-1/2) < 30$ berechne ich $I_2(z)$ näherungsweise mit dem Gauß-Verfahren. Für eine Genauigkeit von etwa 8 Stellen braucht man 20 Gauß-Punkte. Falls $(Z-1/2) \geqslant 30$ ist, schreibe ich für $I_2(z)$:

$$I_2(z) = \int_0^{30} dy \, \frac{e^{-y}}{z-y} + \int_{30}^{z-1/2} dy \, \frac{e^{-y}}{z-y}$$

$$= \int_0^{30} dy \, \frac{e^{-y}}{z-y} + e^{-30} \int_0^{z-30.5} dy \, \frac{e^{-y}}{z-30-y} \qquad \text{(F.2.5)}$$

Im folgenden zeige ich, daß der zweite Term in (F.2.5) im Vergleich zum ersten Integral zu vernachlässigen ist. Dazu schätze ich das erste Integral nach unten ab:

$$\int_0^{30} dy \, \frac{e^{-y}}{z-y} \geqslant \int_0^{30} dy \, \frac{e^{-y}}{z} = \frac{1}{z} \left(1 - e^{-30}\right) \approx \frac{1}{z} \qquad \text{(F.2.6)}$$

Die Abschätzung des zweiten Integrals nach oben liefert:

$$\int^{z-30.5} dy \, \frac{e^{-y}}{z-30-y} = \int_0^{z/2-30.5/2} dy \, \frac{e^{-y}}{z-30-y} + \int_{z/2-30.5/2}^{z-30.5} dy \, \frac{e^{-y}}{z-30-y}$$

$$\leqslant \int_0^{z/2-30.5/2} dy \, \frac{e^{-y}}{z-30-(z/2-30.5/2)}$$

$$+ \int_{z/2-30.5/2}^{z-30.5} dy \, \frac{e^{-y}}{z-30-(z-30.5)}$$

$$= 2\left[\frac{1}{z-29.5} + e^{-1/2(z-30.5)}\left(1 - \frac{1}{z-29.5}\right) - e^{-(z-30.5)}\right] \qquad \text{(F.2.7)}$$

Damit wird der zweite Term in (F.2.5) $(Z \geqslant 30.5)$

$$e^{-30} \int_0^{z-30.5} dy \, \frac{e^{-y}}{z-30-y} \leqslant 2e^{-30}\left(\frac{1}{z-29.5} + e^{-1/2(z-30.5)} \times \frac{z-30.5}{z-29.5} - e^{-(z-30.5)}\right) \qquad \text{(F.2.8)}$$

Aus (F.2.8) und (F.2.6) ergibt sich, daß das zweite Integral in (F.2.5) für alle Z > 30.5 um einen Faktor von etwa $2 \cdot e^{-30}$ kleiner als das erste Integral ist. Diese Abschätzung wurde durch die numerische Rechnung bestätigt. Daher schreibe ich:

$$I_2(z) \approx \int_0^{30} dy \, \frac{e^{-y}}{z-y} \qquad \text{für } z \geq 30.5 \qquad \text{(F.2.9)}$$

Dieses Integral berechne ich mittels Gauß-Integration, wobei für eine Genauigkeit von etwa 8 Stellen 20 Gauß-Punkte notwendig sind.

Literaturangaben

1. J.D. Bjorken and S.D. Drell, Relativistic Quantum Mechanics, Vol. I (Mc. Graw-Hill, New-York, 1964)

2. F. Beck, H. Steinwedel and G. Süssmann, Z. f. Physik 171 (1963) 189

3. A.I. Akhiezer and V.B. Berestetskii, Quantum Electrodynamics (New York, J. Wiley&Sons, 1965)

4. I. Pomeranchuk and J. Smorodinsky, J. Phys. USSR 9 (1945) 97

5. W. Pieper and W. Greiner, Z. f. Physik 218 (1969) 327

6. Ya.B. Zeldovich and V.S. Popov, Sov. Phys. Uspekhi 14 (1972) 673

7. V.S. Popov, Sov. J. Nucl. Phys. 12 (1971) 235

8. V.S. Popov, Sov. Phys. JETP 32 (1971) 526

9. B. Müller, H. Peitz, J. Rafelski and W. Greiner, Phys. Rev. Letters 28 (1972) 1235

10. B. Müller, J. Rafelski and W. Greiner, Z. f. Physik 257 (1972) 62

11. B. Müller, J. Rafelski and W. Greiner, Z. f. Physik 257 (1972) 183

12. J. Rafelski, B. Müller and W. Greiner, Nucl. Phys. B 68 (1974) 585

13. J. Rafelski, L.P. Fulcher and A. Klein, Phys. Report 38 C (1978) 227

14. H. Bokemeyer, H. Folger, H. Grein, S. Ito, D. Schwalm, P. Vincent, K. Bethge, A. Gruppe, R. Schulé, M. Waldschmidt, J.S. Greenberg, J. Schweppe and N. Trautmann, GSI Scientific Report 1980, P. 127

15. E.H. Wichmann and N.M. Kroll, Phys. Rev. 101 (1956) 843

16. M. Gyulassy, Phys. Rev. Letters 33 (1974)1393

17. M. Gyulassy, Phys. Rev. Letters 33 (1974) 921

18. M. Gyulassy, Nucl. Phys. A 244 (1975) 497

19. L.S. Brown, R.N. Cahn and L.D. Mc Lerran, Phys. Rev. D 12 (1975) 581

20. L.S. Brown, R.N. Cahn and L.D. Mc Lerran, Phys. Rev. D 12 (1975) 596

21. L.S. Brown, R.N. Cahn and L.D. Mc Lerran, Phys. Rev. D 12 (1975) 609

22. G.A. Rinker, Jr. and L. Wilets, Phys. Rev. A 12 (1975) 748

23. N. Panchapakesan, Phys. Lett. 35 B (1971) 522

24. G.E. Brown and G.W. Schaefer, Proc. Roy. Soc. (London) A 233 (1956) 527

25. G.E. Brown, J.S. Langer and G.W. Schaefer, Proc. Roy. Soc. (London) A 251 (1959) 92

26. P.J. Mohr, Annals Phys. 88 (1974) 52

27. P.J. Mohr, Annals Phys. 88 (1974) 26

28. K.T. Cheng and W.R. Johnson, Phys. Rev. A 14 (1976) 1943

29. K.T. Cheng, W.D. Sepp, W.R. Johnson and B. Fricke, Phys. Rev A 17 (1978) 489

30. H.A. Bethe and E.E. Salpeter, Phys. Rev. 82 (1951) 309

31. D.R. Yennie, S.C. Frautschi and H. Suura, Annals Phys. 13 (1961) 379

32. J.M. Jauch and F. Rohrlich, The Theory of Photons and Electrons (Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin, 1976)

33. S.S. Schweber, Introduction to Relativistic Quantum Field Theory (Row, Peterson&Co, Evanston, III, 1961)

34. G. Källen, Helv. Phys. Acta 22 (1949) 637

35. F. Gross, Phys. Rev. 186 (1969) 1448

36. L. Müller and W. Glöckle, Nucl. Phys. B 146 (1978) 393

37. M. Gell-Mann and F. Low, Phys. Rev. 84 (1951) 350

38. R. Blankenbecler and R. Sugar, Phys. Rev. 142 (1966) 1051

39. M.L. Partovi and E.L. Lomon, Phys. Rev. D 2 (1970)1999

40. W.F. Ford, Phys. Rev. B 133 (1964) 1616

41. W.F. Ford, J. Math. Phys. 7 (1966) 626

42. J. Dollard, J. Math. Phys. 5 (1964) 729

43. V.G. Gorshkov, Sov. Phys. JETP 13 (1961) 1037

44. J.R. Taylor, Nuovo Cimento 23 B (1974) 313

45. J.C. Chen and A.C. Chen, in Advances of Atomic and Molecular Physics, edited by D.R. Butes and J. Estermann (Academic New York 1972), Vol. 8

46. H. von Haeringen and R. Wageningen, J. Math. Phys. 16 (1975) 144

47. M. Kolsrud, J. Phys. A 11 (1978) 1271

48. W. Pauli and F. Villars, Rev. Mod. Phys. 21 (1949) 434

49. J. Schwinger, Phys. Rev. 82 (1951) 664

50. W. Glöckle, G. Hasberg and A.R. Neghabian, to be published

51. G. Jordan-Engeln und F. Reutter, Formelsammlung zur Numerischen Mathematik mit Fortran IV-Programmen, B.I. Hochschultaschenbücher (1976)

52. Lecture Notes in Computer Science Vol. 6: B.T. Smith, J.M. Boyle, J.J. Dongurra, B.S. Garbow, Y. Lkebe, V.C. Klema and C.B. Moler, Matrix Eigensystem Routines-EISPACK Guide, 2nd Edition, (Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin, 1976)

53. R.A. Malfliet and J.A. Tjon, Nucl. Phys. A 127 (1969) 161

54. G.A. Baker and J.L. Gammel, The Padé-Approximant in Theorectical Physics, New York (1970)

55. W. Magnus, F. Oberhettinger and R.P. Soni, Formulas and and Theorems of the Special Functions of Mathematical Physics, 3rd Edition, (Springer-Verlag, New York 1966)

56. M. Abramowitz and I.A. Stegun, ed. Handbook of Mathematical Functions, NBS Applied Mathematics Series (Washington, 1966)

57. J. Miller and R.P. Hurst, Math. Comp. 12 (1958) 187

58. C.J. Tranter, Integral Transforms in Mathematical Physics London: 3rd Edition (Methuen&Co. LTD., New York: J. Wiley &Sons , INC. 1966)

59. M.E. Rose, Relativistic Electron Theory, New York, Wiley (1961)

60. W. Magnus, F. Oberhettinger and F.G. Tricomi, Higher Transcendental Functions, Vol. I, Chap. 6, (Mc Graw-Hill, New York, 1953)

61. B. Friedman, Principles and Techniques of Applied Math. (Wiley, New York 1956)

Herrn Professor Dr. W. Glöckle danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und für viele wertvolle Diskussionen,
Herrn Dr. L. Müller für sein geduldiges und aufmunterndes Interesse in vielen Gesprächen.
Dem Rechenzentrum der Universität zu Köln möchte ich für die Überlassung der Rechenzeit danken.
Außerdem danke ich dem Deutschen Akademischen Austauschdienst für die Gewährung eines Stipendiums.

Lebenslauf

Name:	Ali-Reza Neghabian
geboren:	21.4.1948 in Ghutschan, Iran
Vater:	Mohammed Neghabian
Mutter:	Sadigeh Neghabian, geb. Heydarian
Schulbesuch:	1955 - 1961 Mehredad Schule, Ghutschan 1961 - 1966 Goving Gymnasium, Ghutschan 1966 - 1967 Nassirzadeh Gymnasium, Meshed
Math. Abitur:	September 1967
Studium:	WS 1967 - SS 1971 Physikstudium an der Universität Meshed mit dem Abschluß B.S. April 1971 - November 1972 Ableistung des Militärdienstes in Schiraz, Iran SS 1973 - SS 1974 Deutschkursus an der Universität Bochum WS 1974 Fortsetzung des Physikstudiums an der Universität Bochum April 1978 Diplomprüfung bei Prof. Glöckle

DER DRUCKER - Buscheystraße 138 - 4630 Bochum - Tel. (02 34) 70 41 16